INAUGURAL - DISSERTATION zur Erlangung der Doktorwürde der Naturwissenschaftlich - Mathematischen Gesamtfakultät der Ruprecht – Karls – Universität Heidelberg

> vorgelegt von Dipl.-Phys. Ekaterina Lüttjohann aus Ul'janovsk, Russland Tag der mündlichen Prüfung: 21. Juli 2011

Chemische und mineralogische Entwicklung Protoplanetarer Scheiben

Gutachter: Prof. Dr. Hans–Peter Gail Prof. Dr. Mario Trieloff

Zusammenfassung

Moderne Messmethoden liefern Informationen über die chemische Zusammensetzung von Kometen und protoplanetaren Scheiben. Studien der Isotopenanomalien in Meteoriten liefern zudem Erkenntnisse über die Entstehungsbedingungen von Verbindungen. Die Entstehungsgeschichte und Evolutionswege dieser Verbindungen sind jedoch nicht immer bekannt.

In dieser Arbeit wird die chemische und mineralogische Zusammensetzung von protoplanetaren Scheiben in ihrer frühen Entwicklungsphase modelliert. Die Ergebnisse der Simulationen liefern Informationen über die frühen Bestandteile der inneren Bereiche von Akkretionsscheiben.

Es wird gezeigt, dass Kalzium– und Aluminium–haltige Einschlüsse, welche zu den ältesten Staubteilchen im Sonnensystem gehören, bereits während des protostellaren Kollapses gebildet werden und in Abstände von bis zu mehreren Zehn AU vom Entstehungsgebiet transportiert werden können.

In der Arbeit werden zudem die Zerstörungsmechanismen präsolarer SiC–Teilchen untersucht. Aus der Rechnungen folgt, dass die relative Menge des präsolaren SiC im Verhältnis zum präsolaren Kohlenstoff nicht allein durch Oxidationsvorgänge im Sonnennebel zu erklären ist.

Ein weiteres Kapitel der Arbeit beschäftigt sich mit der Kohlenwasserstoffentwicklung in den protoplanetaren Scheiben. Mit Hilfe der Reaktionskinetik werden bis zu 45 Spezies in der Gasphase simuliert. Dafür werden bis zu 220 Reaktionen berücksichtigt. Die Rechnungen zeigen, dass die Verdampfung der Kohlenstoffpartikel den entscheidenden Beitrag zur Entstehung der Kohlenwasserstoffe in den inneren Teilen der Akkretionsscheiben liefert.

Abstract

Modern measurement techniques provide a lot of information about the chemical composition of comets and protoplanetary disks. Studies of the istotopic composition of meteorites provide further information about the conditions of formation for these compounds. However, the history of formation and the evolution paths of these species are often not known.

This work shows that the oldest compounds of the solar system, the calcium aluminum rich inclusions (CAIs) may form during the collaps of a molecular cloud. After the formation they are transported to distances several ten AU away from the region of their formation.

Furthermore, the destruction mechanisms of presolar SiC particles are studied in this work. The calculations show that the ratio between presolar SiC grains and presolar carbon grains in meteorites cannot be explained solely by oxidation processes in the solar nebula.

Another chapter of this work describes the chemical evolution of hydrocarbons in protoplanetary disks. The gas phase chemistry is calculated using methods of chemical kinetics. For this purpose 45 species and 220 reactions are included in the calculation. It is shown that the destruction of carbon grains leads to the formation of hydrocarbons in the inner parts of protoplanetary disks.

Unsere größte Schwäche liegt im Aufgeben. Der sichere Weg zum Erfolg ist immer, es doch noch einmal zu versuchen.

Thomas Alva Edison (1847 - 1931)

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	Einleitung					
	1.1	tionsscheibe	2				
		1.1.1	Einzonenmodell	2			
		1.1.2	Transportprozesse	5			
	1.2	2 Chemie im thermodynamischen Gleichgewicht					
		1.2.1	Massenwirkungsgesetz	9			
		1.2.2	Gleigewichtschemie in der Akkretionsscheibe	11			
		1.2.3	Verdampfung und Wachstum der Staubpartikel	18			
		1.2.4	Ratenterm in Transport–Diffusionsgleichung	20			
		1.2.5	Tempern der Silikate	21			
		1.2.6	Opazität	23			
2	Kalz	ium– u	nd aluminiumreiche Einschlüsse	27			
	2.1	Einleit	ung	27			
	2.2 Kollapsmodell			29			
		2.2.1	Implizites Modell	31			
		2.2.2	Explizites Modell	36			
		2.2.3	Transport–Diffusionsgleichung	44			
	2.3	Modellbeschreibung					
	2.4	4 Ergebnisse und Diskussion					
		2.4.1	Implizites Kollapsmodell	57			
		2.4.2	Explizites Kollapsmodell	63			
		2.4.3	Diskussion und Ausblick	70			
3	Zerstörung präsolarer SiC–Teilchen in protoplanetaren Scheiben						
	3.1 Einleitung						
	3.2	Kohlenstoffzerstörung					
	3.3						
	3.4	.4 Ergebnisse					
	3.5						

4 Kohlenwasserstoffe

4.1	ung	. 95				
4.2	Chemi	sche Kinetik	. 97			
	4.2.1	xml–Baum	. 99			
	4.2.2	Rückwärtsreaktionen	. 99			
4.3	Numer	rische Lösungsmethode	. 101			
	4.3.1	Rußverbrennung	. 105			
4.4	Ergebi	nisse	. 106			
	4.4.1	Wasserstoffdissoziation	. 106			
	4.4.2	Wasserstoff- und Sauerstoffchemie	. 108			
	4.4.3	Kohlenwasserstoffchemie	. 108			
4.5	Zusam	menfassung	. 122			
4.6	Ausbli	ck	. 123			
Literaturverzeichnis						

123

95

Kapitel 1

Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der frühen Phase der Planetenentstehung. Dabei wird die chemische und mineralogische Zusammensetzung von Objekten wie kollabierenden Molekülwolken und Akkretionsscheiben besonders detailliert untersucht.

Nach heutigen Forschungserkenntnissen bilden sich Sterne und protostellare (oder protoplanetare) Scheiben aus den Kernen von Molekülwolken (siehe z. B. Larson 2003, 1989). Schon während der Kollapsphase finden komplizierte chemische Prozesse in der Materie in der Wolke statt. Steigen die Temperaturen und Dichten in der Wolke um mehrere Größenordnungen an (siehe Kapitel 2), werden die thermischen Energien der Moleküle und der Staubteilchen größer. Das führt zu den ersten wesentlichen Änderungen der ursprünglichen Materie und zur Bildung erster Minerale bereits in dieser frühen Phase der Planetensystementwicklung.

Bei einem Kollaps entsteht ein Protostern, um welchen Materie aus der ursprünglichen Molekülwolke in der Form einer Scheibe rotiert. Das Material aus der Scheibe akkretiert zu dem Protostern. Bei diesem Prozess wird die Materie erhitzt. Die Änderung der Temperatur begünstigt chemische Reaktionen. In der Akkretionsscheibe finden komplizierte Gasphasenreaktionen, Sublimation, Kristallisation, Oxidation und mehrere andere chemische Vorgänge statt. Einige von diesen Prozessen werden in dieser Arbeit untersucht.

Diese Arbeit ist in vier Kapitel geteilt. In dem ersten Teil sind die Grundlagen einiger theoretischer Modelle beschrieben, die für das Verständnis dieser Arbeit wichtig sind. Im zweiten Kapitel wird die Entstehungsgeschichte der kalzium– und alminiumreichen Einschlüsse verfolgt. In dem Kapitel wird der Prozess der Entstehung dieser Minerale währen der Kollapsphase einer Molekülwolke untersucht. Im dritten Kapitel werden die Zerstörungmechanismen der präsolaren SiC–Teilchen in der Akkretionsscheibe untersucht. Die Untersuchung dieses Prozesses ist wichtig für das Verständnis der beobachteten Mengen dieser Partikel in Meteoriten. Im vierten Kapitel werden chemische Umwandlungen von Kohlenwasserstoffen in Akkretionsscheiben untersucht. Jedes Kapitel beginnt mit einer kleinen thematischen Einführung.

1.1 Akkretionsscheibe

In diesem Abschnitt werden eindimensionale Modelle protoplanetarer Akkretionsscheiben betrachtet. Diese Scheiben bestehen aus Gas und kleinen Staubpartikeln, welche um ein Zentralobjekt – um einen Protostern –rotieren. In den hier betrachteten Modellen existieren keine Gravitationsinstabilitäten. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt bei der Untersuchung der chemischen und mineralogischen Prozesse in der Scheibe. Um diese komplizierten Materialveränderungen genau zu verfolgen, ist es häufig von Vorteil, eine Einzonennäherung für das Scheibenmodell zu verwenden.

1.1.1 Einzonenmodell

Stationäres Modell

In diesem Abschnitt wird ein stationäres Einzonenmodell der Scheibenentwicklung (Pringle 1981; Gail 2001) präsentiert. Dieses Modell lässt es zu, komplizierte chemische und physikalische Prozesse in der Scheibe ohne großen rechnerischen Aufwand zu verfolgen.

In dem hier dargestellten Modell werden Symmetrieannahmen getroffen (Rotationssymmetrie, Spiegelsymmetrie bezüglich Äquatorebene). Diese Annahmen sind realistisch, solange die Scheibe nicht so massiv ist, dass Gravitationsinstabilitäten auftreten können. Eine weitere Annahme ist, dass die Scheibe in radialer Richtung viel ausgedehnter ist als in vertikaler Richtung. Sie ist damit ein geometrisch dünnes Objekt. Alle Größen werden in vertikaler Richtung gemittelt. Die Bewegungsgleichungen lassen sich mit Hilfe der Erhaltungsgesetze ableiten.

Die hier aufgelisteten Gleichungen beschreiben eine dünne stationäre Scheibe in eindimensionaler Nährenung (vgl. z. B. Lin und Papaloizou 1985; Pringle 1981).

• Die Materie in der Scheibe bewegt sich auf KEPLERbahnen mit der Rotationsgeschwindigkeit:

$$\Omega_{\rm K} = \sqrt{\frac{GM_*}{r^3}} \,. \tag{1.1}$$

Hierbei ist M_* die Masse des zentralen Protosterns. Da dieses Modell die späte Phase der Scheibenentwicklung beschreibt, bleibt die Masse des Sterns konstant mit der Zeit. r ist der Abstand zum Protostern und G ist die Gravitationskonstante.

• Bei der Akkretion von Masse wird Gravitationsenergie in thermische Energie umgesetzt. Diese wird über die Scheibenoberfläche abgestrahlt. Die effektive Temperatur, mit der die Energie von der Oberfläche der Scheibe abgestrahlt wird, wird durch

$$T_{\rm eff}^4 = \frac{3GM_*\dot{M}}{8\pi\sigma r^3} \left(1 - \sqrt{\frac{R_*}{r}}\right). \tag{1.2}$$

bestimmt. Hierbei ist σ die STEFAN-BOLTZMANNKONStante, R_* ist der Sternradius. Mit \dot{M} ist die Akkretionsrate bezeichnet. Die Akkretionsscheibe wird zusätzlich durch die Strahlung des Protosterns erhitzt. Der Beitrag der Strahlung zur Temperatur ist durch die Näherung in Gl (1.9) berücksichtigt.

• Die isotherme Schallgeschwindigkeit ist durch

$$c_0{}^2 = \frac{kT_c}{\mu m_{\rm H}},$$
(1.3)

definiert, wobei T_c die Temperatur in der Mittelebene der Scheibe, μ das mittlere Molekulargewicht, m_H die Masse des Wasserstoffatoms, und k die Boltzmann-Konstante ist.

 Aus der Bedingung, dass sich in vertikaler Richtung ein hydrostatisches Gleichgewicht einstellt, und dass das Gas in der Scheibe sich wie ein ideales Gas verhält, folgt der Ausdruck für die Dicke der Scheibe. Die Hälfte der Scheibendicke wird als Funktion der Schallgeschwindigkeit und der KEPLERgeschwindigkeit bestimmt:

$$h = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{c_0}{\Omega_{\rm K}} \,. \tag{1.4}$$

 In α–Näherung ist die Viskosität eine Funktion der Scheibendicke und Schallgeschwindigkeit (Shakura und Syunyaev 1973):

$$\nu = \alpha h c_0 \,. \tag{1.5}$$

Hierbei ist α ein Viskositätsparameter, welcher in den Rechnungen einen konstanten Wert annimmt.

• Die Drehimpulserhaltung führt auf folgenden Ausdruck:

$$\nu\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi} \left(1 - \sqrt{\frac{R_*}{r}} \right). \tag{1.6}$$

Diese Gleichung dient zur Bestimmung der Flächendichte Σ in der Scheibe.

• Die Massendichte der Materie in der Mittelebene der Scheibe ist:

$$\rho_{\rm c} = \frac{\Sigma}{2h} \,. \tag{1.7}$$

• Die optische Tiefe in der Mittelebene wird durch Materialfunktionen definiert:

$$\tau = \frac{1}{2} \Sigma \kappa_{\rm R}(\rho_{\rm c}, T_{\rm c}) \,. \tag{1.8}$$

Hierin ist $\kappa_{\rm R}(\rho_{\rm c}, T_{\rm c})$ der Rosseland–Mittelwert des Extinktionskoeffizienten der Materie in der Mittelebene der Scheibe. • Die Temperatur in der Mittelebene (Ruden und Pollack 1991) ist

$$T_{\rm c}^{4} = T_{\rm mol}^{4} + \frac{1}{2} T_{\rm eff}^{4} \left[1 + \frac{3}{2} \tau_{\rm c} \right] + T_{*}^{4} \left[\frac{2}{3\pi} \left(\frac{R_{*}}{r} \right)^{3} + \frac{1}{2} \frac{h}{r} \left(\frac{R_{*}}{r} \right) \right].$$
(1.9)

Hierin ist T_{mol} die Temperatur der umgebenden Molekülwolke. In den Rechnungen hat die Temperatur T_{mol} den Wert 20 K. T_* ist die Temperatur des Protosterns. Der Summand $T_*^4 \left[\frac{2}{3\pi} \left(\frac{R_*}{r} \right)^3 + \frac{1}{2} \frac{h}{r} \left(\frac{R_*}{r} \right) \right]$ in Gl. (1.9) beschreibt den Beitrag zur Temperatur durch Strahlung des Sterns. Dieser wird in den äußeren Bereichen der Scheibe wichtig. In den inneren Zonen der Scheibe hat die viskose Dissipation den dominierenden Einfluss auf die Temperatur. Bei niedrigen Akkretionsraten ist die Strahlung auch in den inneren Bereichen wichtig. In diesem Modell wurde angenommen, dass $\frac{d\ln h}{d\ln s} = p = const$ und $p = \frac{9}{7}$ ist (Hueso und Guillot 2005).

• Die Gleichung

$$\dot{M}(r,t) = -2\pi r \Sigma v_r \tag{1.10}$$

beschreibt die Massenerhaltung der Materie in der Scheibe. Hierbei ist \dot{M} die Akkretionsrate (sie hat einen konstanten Wert im Fall einer stationären Scheibe), und v_r steht für die radiale Geschwindigkeit der Materie in der Scheibe.

• Die Zustandsgleichung eines idealen Gases liefert die Beziehung zwischen dem Druck in der Mittelebene und der Dichte in der Mittelebene:

$$P_{\rm c} = \rho_{\rm c} \cdot c_0^2 \,. \tag{1.11}$$

• Das mittlere Molekulargewicht ist

$$\mu(\rho,T) = \frac{p_{\rm H} + 2p_{\rm H_2} + 4p_{\rm He}}{p_{\rm H} + p_{\rm H_2} + p_{\rm He}}.$$
(1.12)

Diese Gleichung ist in den Rechnungen des thermodynamischen Gleichgewichts enthalten. Hierbei ist berücksichtigt, dass die häufigsten Gasspezies in der Scheibe Wasserstoff und Helium sind. Bei Temperaturen über 2000 K beginnt Wasserstoff zu dissoziieren. Bei kleineren Temperaturen ist Wasserstoff fast nur in molekularer Form vorhanden.

• Die Opazität der Materie ergibt sich aus der Summe der Beiträge der einzelnen Materiekomponenten

$$\kappa_{\rm R} = \sum_{i} \kappa_{{\rm R},i}(\rho,T) \,. \tag{1.13}$$

In dieser Gleichung werden die Häufigkeit und Extinktionseigenschaften der Moleküle und der kondensierten Phasen berücksichtigt. Für die Staubkomponenten ist es auch wichtig, ob sie in kristalliner oder in amorpher Form vorkommen. In Bereichen der Scheibe, in denen der Staub komplett verdampft ist, sind die Gasspezies für die Opazitätseigenschaften der Materie verantwortlich. Die wichtigsten chemische Prozesse, die in der Scheibe ablaufen, werden im Abschnitt 1.2 beschrieben.

Die oben beschriebenen Gleichungen werden numerisch für vorgegebene \dot{M} , M_* , L_* , T_* , T_{mol} und α gelöst. Für die frühe Phase der Entwicklung der Akkretionscheibe werden typische Werte von $M_* = 1 \text{ M}_{\odot}$, $L_* = 5 \text{ L}_{\odot}$ und $T_* = 4500 \text{ K}$ als Parameter des jungen Protosterns gewählt. Der Viskositätskoeffizient wird auf einen von Wert $\alpha = 3 \times 10^{-3}$ gesetzt. Dieser Wert wird aus dem Vergleich von zeitabhängigen Modellen mit Beobachtungen junger, stellarer Objekte (siehe Haisch u. a. 2001) erhalten. Die Temperatur der umgebenden Molekülwolke ist auf T = 20 K gesetzt. Die Akkretionsrate \dot{M} ist eine Charakteristik der modellierten Zeitperiode. Sie kann Werte von 10^{-7} bei frühen bis 10^{-9} bei sehr späten Entwicklungsphasen annehmen.

Zeitabhängiges Modell

Im zeitabhängigen Modell gelten vorwiegend dieselben Gleichungen wie im stationären Fall. Im zeitabhängigen Modell sieht die Drehimpulserhaltung allerdings folgendermaßen aus:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = \frac{3}{r} \frac{\partial}{\partial r} r^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial r} r^{\frac{1}{2}} v \Sigma.$$
(1.14)

Diese Gleichung ersetzt die Gleichung (1.6) im oben beschriebenen Gleichungssystem. Im Unterschied zum stationären Fall wird die Akkretionsrate nicht vorgegeben, sondern bei jedem Zeitschritt berechnet:

$$\dot{M} = -6\pi r^{\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial r} r^{\frac{1}{2}} \nu \Sigma.$$
(1.15)

Da im Ausdruck (1.2) die stationäre Form der Drehimpulserhaltung angewendet wurde, muss die Gleichung für viskose Energiedissipation für den zeitabhängigen Fall umgeschrieben werden:

$$\sigma T_{\rm eff}^{4} = \frac{9}{8} \nu \Sigma \frac{G M_{*}}{r^{3}} \,. \tag{1.16}$$

Das zeitabhängige Modell wird ausführlich in der Arbeit von Wehrstedt und Gail (2002a) diskutiert.

1.1.2 Transportprozesse

In dieser Arbeit wird die chemische und mineralogische Entwicklung einiger Substanzen während ihrer Bewegung innerhalb einer kollabierenden Wolke oder innerhalb einer Akkretionsscheibe untersucht. Den Transport der einzelnen Spezies durch advektive Strömungen, durch Mischungsprozesse sowie durch ihre chemischen Veränderungen beschreibt die Kontinuitätsgleichung (siehe Hirschfelder u. a. (1964))

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}_i n_i = \nabla \cdot n D_i \nabla c_i + R_i.$$
(1.17)

Hier sind *n* die gesamte Teilchendichte und n_i die Teilchendichten der Spezies *i*. Da die Mechanismen des Drehimpulstransports und der diffusiven Mischung nicht genau bekannt sind, wird der Diffusionskoeffizient aus experimentellen Befunden bestimmt und wird aus $D = \nu/\text{Sc}$ ermittelt, wobei Sc die Schmidt–Zahl ist und ν die Viskosität. In den folgenden Simulationen wird die Schmidt–Zahl gleich Eins gesetzt. Der Diffusionskoeffizient ist gleich für jedes Gas– oder Staubpartikel. Voraussetzung dafür ist, dass die Staubpartikel klein genug ($\geq 10\mu$ m) sind, dass sie dynamisch stark an das Gas gekoppelt sind.

Die Teilchenkonzentration c_i einer Spezies *i* wird mit

$$c_i = \frac{n_i}{n} \tag{1.18}$$

definiert, wobei die gesamte Teilchendichte n meistens gleich der Dichte der Wasserstoffkerne gesetzt wird, \mathbf{v}_i ist die mittlere Geschwindigkeit des Teilchens i.

Der Ratenterm R_i beschreibt die chemischen und mineralogischen Prozesse, an denen das Objekt *i* von Interesse (Gasmolekül oder Staubpartikel) beteiligt ist. Die Rate wird vorwiegend aus experimentellen Beobachtungen bestimmt. Sie beschreibt, wie ein Molekül oder Staubpartikel *i* unter verschiedenen Bedingungen produziert oder vernichtet wird. Auf den Ratenterm haben Faktoren wie Temperatur und Teilchendichte einiger Substanzen großen Einfluss. In den folgenden Abschnitten wird der Ratenterm R_i ausführlich diskutiert.

In dieser Arbeit werden chemische Prozesse in einem Temperaturbereich untersucht, in dem Materie auch in kondensierter Form existieren kann. Dies ist folglich ein Bereich, in dem keine Wasserstoffdissoziation stattfindet. Die gesamte Teilchendichte wird durch die Teilchendichte des molekularen Wasserstoffs und He definiert zu $n = n_{H_2} + n_{He}$, weil diese Gasspezies in diesem Temperaturbereich dominieren. Die Kontinuitätsgleichung des Trägergases ist

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v} \, n \,=\, 0 \,. \tag{1.19}$$

Dann sieht Gleichung (1.17) in zylindrischen Koordinaten folgendermaßen aus:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} s v_s n_i + \frac{\partial}{\partial z} v_z n_i = \frac{1}{s} \frac{\partial}{\partial s} s n D \frac{\partial c_i}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial z} n D \frac{\partial c_i}{\partial z} + R_i.$$
(1.20)

Die Gleichung muss für Anwendung in Einzonenmodellen über die vertikale Richtung gemittelt werden. Wegen Gl. (1.19) folgt für die Konzentrationen

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_{r,i} \frac{\partial c_i}{\partial r} = \frac{1}{rnh} \frac{\partial}{\partial r} r n h D \frac{\partial c_i}{\partial r} + R_i.$$
(1.21)

Die Herleitung der Gleichung (1.20) wird in der Arbeit von Gail (2001) ausführlich diskutiert. Die Transport–Diffusionsgleichung beschreibt die Strömungen, die aufgrund von Turbulenz und Konvektion auftreten. Als Ergebnis dieser Strömungen finden in kollabierenden interstellaren Wolken und Akkretionsscheiben Materieflüsse statt, die sich sowohl ins Zentrum des rotierenden Objekts als auch in Richtung aus dem zentralen Bereich nach außen bewegen können. Diese Mischungsprozesse beeinflussen die chemische Entwicklung der Akkretionsscheiben und kollabierenden Molekülwolken auf großen Skalen.

1.2 Chemie im thermodynamischen Gleichgewicht

Beim Einmischen von Materie in heiße Gebiete einer Akkretionsscheibe oder in einer kollabierenden Wolke beginnt sich das ursprüngliche Material zu verändern. In den warmen Bereichen finden chemische und physikalische Veränderungen statt. Der amorphe Silikatstaub beginnt bei Temperaturen zwischen 800 K–900 K zu kristallisieren. Durch die Wärme werden interne Diffusionsprozesse in den Staubkörnern aktiviert, die zur Homogenisierung und Ausscheidungsprozessen führen können. Manche Staubsorten werden durch Oxidationsprozesse abgebaut. Andere Minerale verdampfen bei hohen Temperaturen.

Chemische Staubveränderungen werden gut durch die chemische Kinetik beschrieben. Solche Rechnungen sind in der Regel mit viel Aufwand verbunden. Für solche Simulationen ist man zudem auf experimentelle Daten für große Reaktionsnetzwerke angewiesen. Deshalb ist es vernünftig, zur ersten Näherung die Rechnungen der chemischen Zusammensetzung zunächst im thermodynamischen Gleichgewicht durchzuführen. Bei dieser Art von Rechnungen werden die stabilsten Moleküle und Verbindungen in der kondesierten Phase bestimmt. Diese Verbindungen sind dann in den meisten Fällen auch in den untersuchten Systemen mit großer Häufigkeit vorhanden, auch wenn kein Gleichgewicht vorliegt.

In dieser Arbeit werden die inneren Bereiche der Akkretionsscheiben und kollabierenden interstellaren Molekülwolken untersucht. In diesen Objekten befinden sich einige Gas- und Staubspezies im thermodynamischen Gleichgewicht. In der Arbeit werden Gleichgewichtsrechnungen im Temperaturbereich ab ca. 300 K und bei Drucken ab ca. 10^{-5} bar durchgeührt, also in einem Bereich, in dem sich ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellen kann.

Die für die Rechnungen notwendigen Formeln lassen sich aus thermodynamischen Potentialen ableiten. Die wichtigste Gleichungen lassen sich unter Verwendung der GIBBSSchen Enthalpie *G* herleiten.

$$\mathbf{G} = \mathbf{E} + p\mathbf{V} - T\mathbf{S} \,. \tag{1.22}$$

Hierbei ist p der Druck im System, V das Volumen und T die Temperatur. Dabei beschreibt pdV die am System geleistete Arbeit und dE die Wärmeänderung. Da jedes System bestrebt

ist, einen Zustand mit minimaler Energie anzunehmen, gilt für GIBBSSche Enthalpie

$$dG = d(E + pV - TS) \le 0 \text{ für } p = \text{const. und } T = \text{const.}$$
(1.23)

Im Gleichgewicht nimmt die GIBBSSche freie Enthalpie ein absolutes Minimum an. Das bedeutet, dass dG = 0 ist. Wenn die Stoffmenge erhalten bleibt, gilt für die innere Energie *E*

$$dE = TdS - pdV. (1.24)$$

Aus Gl. (1.23) und (1.24) folgt

$$\mathrm{d}G = V\mathrm{d}p - S\,\mathrm{d}T\,.\tag{1.25}$$

Diese Gleichung führt zu einer wichtigen thermodynamischen Beziehung:

$$\frac{\partial G}{\partial p} = V. \tag{1.26}$$

In dieser Arbeit werden chemische Gleichgewichtsprozesse bei gegebenem Druck untersucht. In den untersuchten Systemen sind die möglichen Moleküle und Staubsorten vorgegeben. Die häufigsten Verbindungen sind aus experimentellen Beobachtungen bekannt. In der frühen Phase der Planetenentstehung existieren noch keine großen Objekte außer dem Protostern. Die Materie ist nur gasförmig oder als Feskörper in Form kleiner Staubpartikel vorhanden. Aus diesem Grund werden diese zwei Agregatzustände mit Hilfe der Relation (1.26) detailliert untersucht.

Ideales Gas. In Akkretionsscheiben sowie in einer kollabierenden Wolke sind die Drücke sehr klein, daher kann die Gasphase als ideales Gas beschrieben werden. In diesem Fall gilt:

$$pV = nR_{\rm g}T, \qquad (1.27)$$

wobei R_g die Gaskonstante ist. Dann folgt aus Gl. (1.26):

$$G(p, T, n) = G(p_0, T, n) + n R_{\rm g} T \ln\left(\frac{p}{p_0}\right), \qquad (1.28)$$

wobei p_0 der Standarddruck $p_0 = 1$ bar ist und p der Partialdruck der einzelnen Gasspezies ist.

Festkörper. Ein Festkörper besteht aus mehreren Molvolumen V_m . Wenn die Anzahl dieser Volumina *n* ist und Kompressibilitätseffekte vernachläsigbar klein sind, dann ist das Gesamtvolumen $V = n V_m$. Durch die Integration der Gl. (1.26) bekommt man den Ausdruck für die freie Enthalpie

$$G(p, T, n) = G(p_0, T, n) + n V_{\rm m}(p - p_0), \qquad (1.29)$$

mit $p_0 = 1$ bar.

Wenn Mischungseffekte und Oberflächeneffekte vernachlässigbar sind, kann die gesamte freie Enthalpie einer Mischunng als Summe der freien Enthalpien der einzelnen Komponenten berechnet werden:

$$G(p, T, n_i) = \sum_i n_i G_i(p, T).$$
(1.30)

Hier ist G_i die freie Enthalpie pro Mol der Substanz *i*.

Um heterogene Gemische aus Gasen und Feststoffen besser beschreiben zu können, wird der Begriff Aktivität eingeführt. Dieser erlaubt es, die gesamte freie Enthalpie einer Mischung durch die einfache Form

$$G(p, T, n_i) = \sum_i n_i G_i(p_0, T) + \sum_i n_i R_g \ln a_i.$$
(1.31)

auszudrücken. Die Größe *a* steht für die Aktivität einer Gas– oder Staubkomponente *i*. Die freien Enthalpien $G_i(p_0, T)$ werden beim Standarddruck p_0 im Laboratorium gemessen und sind in Form von thermodynamischen Tabellen (u. a. NIST 2008; Barin 1995) verfügbar. Die Aktivitäten werden für jede Gas– oder Staubkomponente berechnet.

Die Beziehungen (1.28) und (1.28) lassen die Aktivität aus Gl. (1.31) für die Gas- und Staubkomponente durch einfache Relationen ausdrücken:

$$\ln a_i = \ln \frac{p_i}{p_0} \qquad \text{für ideales Gas,} \qquad (1.32)$$

$$\ln a_i = \frac{V_{\mathrm{m},i}(p-p_0)}{R_{\mathrm{g}}T} \quad \text{für Festkörper}.$$
(1.33)

Hierbei ist p_i der Partialdruck der Spezies *i* in der Mischung. Die Aktivität der Festkörper ist für den Grenzfall mit niedrigen Drücken dargestellt. Im festen Zustand haben die Komponenten im Gemisch eine Aktivität von a = 1, wegen $R_gT/p \gg V_m$.

Die Gleichung (1.31) definiert die freie Enthalpie eines Gemisches als Funktion der Molzahlen der einzelnen Gemischkomponenten. Bei einer Berechnung des Gleichgewichtszustandes wird nach dem Minimum der Funktion $G(n_i)$ aus Gl. (1.31) gesucht (siehe Gl. (1.23)).

1.2.1 Massenwirkungsgesetz

Die Gleichgewichtszusammensetzung kann aus Gleichung (1.31) bestimmt werden. Die Suche nach dem minimalen Wert der Funktion $G(n_i)$ durch Variation der Molzahlen n_i ist sehr rechenaufwändig und kann zu Rechenproblemen führen. Als Alternative für die Minimumsuche kann die Methode, die auf das Anwenden des Massenwirkungsgesetzes basiert, verwendet werden. Aus der Bedingung, dass jede Spezies im Gleichgewicht mit allen anderen Spezies ist, folgt das Massenwirkungsgesetz. Wenn ein chemisches System mit Spezies A, B, C, D, E, F, ... und stöchiometrischen Koeffizienten a, b, c, d, e, f ... sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet und eine Reaktion vom Typ

$$a \mathbf{A} + b \mathbf{B} + c \mathbf{C} + \ldots \rightarrow d \mathbf{D} + e \mathbf{E} + f \mathbf{F} + \ldots$$
 (1.34)

abläuft, ist die Gleichgewichtsbedingung:

$$\prod_{i} \left(\frac{p_i}{p_0}\right)^{\nu_i} \prod_{i} a_i^{\nu_i} = \exp\left(-\frac{\sum_i \nu_i G_i(p_0, T)}{R_g T}\right) = K_p(T).$$
(1.35)
Gase Feststoffe

Hierbei ist $K_p(T)$ die sogenannte Gleichgewichtskonstante. Der Zähler, der in der Exponentialfunktion steht, beschreibt die Enthalpieänderung bei einer Reaktion. Die Enthalpieänderung wird aus den Enthalpien der Edukte und Produkte¹ bestimmt.

$$\Delta G = \sum_{i} v_i G_i(p_0, T) \,. \tag{1.36}$$

Die stöchiometrischen Koeffizienten v_i haben positive Vorzeichen bei Produkten und negative bei Edukten. Für die Reaktion (1.34) gilt also

$$\Delta G = dG(D) + eG(E) + fG(F) + \dots - aG(A) - bG(B) - cG(C) - \dots$$
(1.37)

Die freien Enthalpien der einzelnen Verbindungen können aus thermodynamischen Tabellen bestimmt werden (u. a. NIST 2008; Barin 1995). In dieser Arbeit wird das Massenwirkungsgesetz häufig bei der Untersuchung der Entstehung chemischer Verbindungen aus freien Atomen angewendet.

Wenn eine Spezies mit der chemischen Formel $A_a B_b C_c...$ sich aus den freien Atomen A, B, C, ... bildet, dann kann die Gleichgewichtsbedingung (1.35) in einer einfachen Form für Moleküle und Festkörper ausgedrückt werden:

$$p_{A_a B_b C_{c...}} = p_A{}^a p_B{}^b p_C{}^c \dots \exp\left(-\frac{\Delta G}{R_g T}\right)$$
 Ideales Gas. (1.38)

$$a_{A_aB_bC_c...} = p_A{}^a p_B{}^b p_C{}^c...exp\left(-\frac{\Delta G}{R_gT}\right) = 1$$
 Festkörper. (1.39)

Alle Drücke in den Gleichungen beziehen sich dabei auf den Standarddruck $p_0 = 1$ bar. Mit den Gleichung (1.39) werden die partiellen Drücke der freien Atomen bestimmt, die Menge des Feststoffs bleibt dabei unbestimmt. Die Pseudoaktivität $a_{A_qB_bC_{c...}}$ kann auch für

¹Als Edukte bezeichnet man die Ausgangsspezies, diese stehen auf der linken Seite der Gleichung (1.34). Produkte sind die Spezies, die nach dem Ablauf der Reaktion gebildet werden. Sie stehen auf der rechten Seite der Gleichung (1.34)

einen Festkörper berechnet werden, welcher nicht im Gleichgewicht mit der Gasphase ist. In diesem Fall zeigt die Aktivität, ob die Bedingungen im System für Verdampfung oder Kondensation des Festkörpers günstig sind. Wenn die partiellen Drücke der freien Atome bekannt sind, werden die Pseudoaktivitäten *a* aus Gl. (1.39) bestimmt. Falls a > 1 wird, begünstigen die Bedingungen im System die Kondensation des Festkörpers. Bei weiterer Erhöhung des partiellen Drucks der freien Atome wird der Festkörper aus der Gasphase kondensieren. Der Fall a < 1 beschreibt die Situation, dass die Verdampfung des Festkörpers begünstigt wird. Wenn a < 1 ist, kann der Festkörper in diesem System nicht existieren.

1.2.2 Gleigewichtschemie in der Akkretionsscheibe

Für die Entwicklung der Akkretionsscheiben spielt die Opazität eine große Rolle. Deswegen ist es sehr wichtig, die wichtigsten Molekül– und Staubkomponenten der Materialmischung zu bestimmen. In dem hier verwendeten Scheibenmodellen werden die stabilsten Gas– und Staubspezies im thermodynamischen Gleichgewicht berechnet.

Bei den chemischen Berechnungen in der Scheibe sind noch ein paar zusätzliche Bedingungen zu beachten. Da der Gesamtdruck *p* innerhalb der ganze Scheibe klein bleibt, wird er als Summe der partiellen Drücke p_i der einzelnen Gaskomponenten *i* definiert: $p = \sum_i p_i$.

Die Anzahl der Mole n_k des Elements k wird aus den Molzahlen n_i der Verbindungen i, die dieses Element enthalten, errechnet zu $n_k = \sum_i v_{i,k} n_i$, wobei $v_{i,k}$ die Anzahl der Atome des Elements k in der chemischen Formel der Spezies i ist.

Wenn ein Element k mit einer Häufigkeit ϵ_k im interstellaren Raum vorkommt und die Anzahl der Atome durch Kernreaktionen nicht verändert wird, kann die Gleichgewichtsbedingung in der Form

$$\epsilon_k P_{\rm H} \left(1 - \sum_{\substack{\text{alle Feststoffe } j \\ \text{mit Element } k}} f_j \frac{\tilde{\epsilon}_j}{\epsilon_k} \right) = \sum_{\substack{\text{alle Moleküle } i \\ \text{mit Element } k}} v_{i,k} p_i$$
(1.40)

geschrieben werden. Hierbei ist f_j der Kondensationsgrad der Verbindung *i* und P_H der fiktive Druck aller Wasserstoffkerne, wenn diese als freie Atome vorhanden wären. Der Kondensationsgrad zeigt den Anteil des Elements *k*, der in der festen Verbindung *j* gebunden ist. Dabei ist $\tilde{\epsilon}_j$ die Häufigkeit des Elements, das die kleinste Häufigkeit unter allen an der Verbindung beteiligten Elemente hat. Wenn sich eine Spezies als Festkörper im Gleichgewicht mit einem Gemisch befindet, dann ist $f_j > 0$ und die Aktivität ist eins. Wenn die Spezies im festen Zustand nicht existieren kann, dann ist $f_j = 0$ und die Aktivität a < 1.

Gleichung (1.40) beschreibt die Erhaltung der Molzahlen in einem Gemisch mit fester Elementhäufigkeit. Sie beschreibt also, dass Material, in dem das Element k enthalten ist, entweder in Gasform oder als Festkörper vorhanden ist. In der Akkretionsscheibe wird Gl. (1.40) für die Berechnung der Mengen der häufigsten Staubkomponenten angewendet. Die hier dargestellten Rechnungen werden in den Scheibenmodellen von Gail (2001, 2004) beschrieben. Bei der Modellierung der Gleichgewichtszusammensetzung der Gasphase werden einige Vereinfachungen eingeführt. In Simulationen werden nur die stabilsten Gasverbindungen verwendet. Diese sind für die häufigsten Elemente:

- Wasserstoffverbindungen: H₂
- Kohlenstoffverbindungen: CO
- Siliziumverbindungen: SiO
- Mg-, Fe-, Ni- und Ca-Verbindungen: nur freie Atome
- Sauerstoffverbindungen: CO, SiO und H₂O
- Schwefelverbindungen: H₂S (evnt. auch SiS).

Praktisch der ganze Stickstoff ist in der Form N₂ vorhanden. Bei Aluminumverbindungen sieht es etwas komplizierter aus. Bei hohen Temperaturen dominiert Al in Form von freien Atomen, bei niedrigen Temperaturen ist auch AlO relativ häufig. Zusätzlich ist im fast ganzen Temperaturbereich AlOH vorhanden. Der Beitrag der Aluminumverbindungen zur Opazität und in der Zustandsgleichung ist vernachlässigbar. Alle anderen gasförmigen Verbindungen dieser Elemente haben kleine Häufigkeiten und werden vernachlässigt.

Partialdruck der Wasserstoffkerne

In den Scheibenmodellen wird angenommen, dass der Gesamtdruck ausschließlich durch H_2 -Moleküle und He-Atome bestimmt wird.

$$p = p_{\rm H_2} + p_{\rm He} \,. \tag{1.41}$$

Der fiktive Druck der Wasserstoffkerne charakterisiert die Anzahl der Wasserstoffatome in der Mischung und ist definiert als $P_{\rm H} = 2p_{\rm H_2}$.

Der Partialdruck der He–Atome wird durch die Heliumelementhäufigkeit ϵ_{He} definiert: $p_{\text{He}} = \epsilon_{\text{He}} P_{\text{H}}$. Daraus folgt

$$P_{\rm H} = \frac{2p}{1+2\epsilon_{\rm He}}.$$
(1.42)

Wenn die Wasserstoffdissoziation nicht stattfindet, ist das mittlere Molekulargewicht

$$\mu = \frac{2p_{\rm H_2} + 4p_{\rm He}}{p_{\rm H_2} + p_{\rm He}} = \frac{2(1 + 4\epsilon_{\rm He})}{1 + 2\epsilon_{\rm He}}.$$
(1.43)

Damit kann der fiktive Druck auch durch die Dichte ρ ausgedrückt werden:

$$P_{\rm H} = \frac{\rho}{(1+4\epsilon_{\rm He})m_{\rm H}}k_{\rm B}T. \qquad (1.44)$$

Hierbei ist $m_{\rm H}$ die Masse des Wasserstoffatoms.

Dissoziationsgleichgewichte

Falls die Temperaturen T=2000 K überschreiten, beginnt die Wasserstoffdissoziation. In diesem Fall sind die häufigsten Gasspezies H, H₂ und He. Ist die Dichte des Gasgemisches bekannt, dann ist der fiktive Druck durch Gl. (1.44) bestimmt.

Die chemische Reaktion der Wasserstoffdissoziation ist

$$\mathbf{H} + \mathbf{H} \to \mathbf{H}_2 \,. \tag{1.45}$$

Laut Massenwirkungsgesetz gilt $p_{\text{H}_2} = p_{\text{H}}^2 K_p(\text{H}_2)$. Hierin ist $K_p(\text{H}_2)$ die Gleichgewichtskonstante aus Gl. (1.35) der chemischen Reaktion (1.45).

Die Gleichung für den fiktiven Druck hat dann noch eine Unbekannte — den partiellen Druck des atomaren Wasserstoffs:

$$P_{\rm H} = p_{\rm H} + 2 p_{\rm H_2} = p_{\rm H} + 2 p_{\rm H}^2 K_p({\rm H_2}). \qquad (1.46)$$

Aus dieser Gleichung kann der Partialdruck $p_{\rm H}$ und als Folge auch $p_{\rm H_2}$ berechnet werden. Falls statt ρ der Gesamtdruck $p = p_{\rm H} + p_{\rm H_2} + p_{\rm He}$ bekannt ist, kann folgende quadratische Gleichung hergeleitet werden:

$$p = p_{\rm H} + p_{\rm H}^2 K_p({\rm H}_2) + \epsilon_{\rm He}(p_{\rm H} + 2 p_{\rm H}^2 K_p({\rm H}_2)). \qquad (1.47)$$

Aus der Lösung dieser Gleichung folgt der Ausdruck für die Massendichte

$$\rho = \frac{m_{\rm H}(1 + 4\epsilon_{\rm He})P_{\rm H}}{p}.$$
(1.48)

Bei den anderen Molekülhäufigkeiten können weitere Vereinfachungen gemacht werden. Als Beispiel wird hier das Dissoziationsgleichgewicht der sauerstoffhaltigen Moleküle betrachtet. Als stabilste sauerstoffhaltige Verbindungen gelten CO und SiO. Diese Moleküle haben hohe Bindungsenergien. Ein großer Teil des Sauerstoffs ist in diesen Verbindungen enthalten. Aufgrund der hohen Häufigkeit des Sauerstoffs müssen auch H₂O und OH berücksichtigt werden. Dann lautet Gl. (1.40)

$$\epsilon_0 P_{\rm H} = p_{\rm CO} + p_{\rm SiO} + p_{\rm OH} + p_{\rm H_2O}.$$
 (1.49)

Die Partialdrücke der Gaskomponente werden aus den Gleichungen

$$p_{\rm CO} = \epsilon_{\rm C} P_{\rm H} \tag{1.50}$$

$$p_{\rm SiO} = \epsilon_{\rm Si} P_{\rm H} \tag{1.51}$$

$$p_{\rm OH} = p_{\rm H} p_{\rm O} K_p(\rm OH) \tag{1.52}$$

$$p_{\rm H_2O} = p_{\rm H}^2 p_{\rm O} K_p({\rm H_2O})$$
 (1.53)

bestimmt. Hierbei ist berücksichtigt, dass fast alle Kohlenstoffatome in CO gebunden sind. Bei hohen Temperaturen sind auch fast alle Si–Atome in SiO gebunden. Bei kleineren Temperaturen bilden sich Silikate.

Wenn die Temperatur niedriger ist, kondensieren die Si-haltigen Minerale. Die freien O-Atome sind in diesem Fall alle in H₂O gebunden. Dann sehen die Gleichungen folgendermaßen aus:

$$p_{\rm H_2O} = \left(\epsilon_{\rm O} - \epsilon_{\rm C} - (1 + \sum_i n_i f_{i,\rm sil}) \epsilon_{\rm Si}\right) P_{\rm H}$$
(1.54)

$$p_{\rm SiO} = \left(1 - \sum_{i} f_{i,\rm sil}\right) \epsilon_{\rm Si} P_{\rm H} \,. \tag{1.55}$$

Hierin sind $f_{i,sil}$ die Kondensationsgrade von Si in den Mineralen und n_i bezeichnet die um Eins reduzierte Anzahl der O–Atome in den entsprechenden Mineralen.

Bei anderen Elementen werden die Dissoziationsgleichgewichte auch in dieser Weise berechnet.

Bildung von Forsterit und Enstatit

Wenn die Materie in warme Bereiche der Scheibe eingemischt wird, entstehen die Silikatverbindungen. Zu den wichtigsten und häufigsten davon gehören Forsterit (Mg₂SiO₄) und Enstatit (MgSiO₃). Hier wird die Situation betrachtet, bei der der Gesamtdruck und die Temperatur vorgegeben sind. Die kondensierte Phase befindet sich im Gleichgewicht mit der Gasphase.

Die chemische Reaktion, die für die Bildung von Forsterit verantwortlich ist, lautet

$$2Mg + SiO + 3H_2O \rightarrow Mg_2SiO_{4(s)} + 3H_2.$$
 (1.56)

Die Gleichgewichtsbedingung (1.39) sieht in diesem Fall folgendermaßen aus:

$$a_{\rm For} = p_{\rm Mg}^2 p_{\rm SiO} p_{\rm H_2O}^3 p_{\rm H_2}^{-3} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm For}}{R_{\rm g}T}\right).$$
(1.57)

Die Änderung der freien Enthalpie ΔG_{For} wird entsprechend der chemischen Reaktion folgendermaßen berechnet:

$$\Delta G_{\text{For}} = \Delta G_f(\text{For}) + 3\Delta G_f(\text{H}_2) - 2\Delta G_f(\text{Mg}) - \Delta G_f(\text{SiO}) - 3\Delta G_f(\text{H}_2\text{O}). \quad (1.58)$$

 ΔG_f ist die freie Enthalpie der Bildung der jeweiligen Spezies. Die Aktivität a_{For} des Forsterits ist gleich Eins.

Enstatit ist das stabilste Silikat bei Temperaturen unter ca. 1 300 K. Enstatit entsteht als Produkt der Reaktion von Forsterit mit H_2 .

$$Mg_2SiO_{4(s)} + 3H_2 \rightarrow MgSiO_3 + Mg + H_2O$$
(1.59)

Nach Gl. (1.39) gilt:

$$a_{\rm Ens} = a_{\rm For} p_{\rm Mg} p_{\rm H_2O} p_{\rm H_2}^{-1} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm Ens}}{R_{\rm g}T}\right).$$
 (1.60)

Die Änderung der freien Enthalpie ΔG_{Ens} wird aus

$$\Delta G_{\text{Ens}} = \Delta G_f(\text{Ens}) + \Delta G_f(\text{Mg}) + \Delta G_f(\text{H}_2\text{O}) - \Delta G_f(\text{For}) - \Delta G_f(\text{H}_2)$$
(1.61)

bestimmt.

Die partiellen Drücke in den Gl. (1.57) und (1.60) werden durch Anwendung der Gleichung (1.40) bestimmt. Die partiellen Drücke der häufigsten Substanzen befinden sich im Gleichgewicht, daraus folgt

$$(\epsilon_{\rm O} - \epsilon_{\rm C} - (4f_{\rm For} + 3f_{\rm Ens})\epsilon_{\rm Si} - \frac{3}{2}f_{\rm cor}\epsilon_{\rm Al})P_{\rm H} = p_{\rm H_2O} + p_{\rm SiO}$$
(1.62)

$$(1 - f_{\text{For}} - f_{\text{Ens}})\epsilon_{\text{Si}}P_{\text{H}} = p_{\text{SiO}}$$
(1.63)

$$(\epsilon_{\rm Mg} - (2f_{\rm For} + f_{\rm Ens})\epsilon_{\rm Si})P_{\rm H} = p_{\rm Mg}. \qquad (1.64)$$

In den Gleichungen (1.62)-(1.64) sind die Gleichgewichtsbedingungen für die Verbindungen, die Sauerstoff, Silizium oder Magnesium enthalten, dargestellt. In Gl. (1.62) ist die Zusammensetzung der sauerstoffhaltigen Gasphase beschrieben. In diesem Fall wird angenommen, dass der ganze Kohlenstoff in CO gebundet ist. Mit $4f_{For}\epsilon_{Si}$ ist der Anteil des Sauerstoffs bezeichnet, welcher in Forsterit gebunden ist. Hier ist berücksichtigt, dass in Forsterit vier Sauerstoffatome gebunden sind. Drei Sauerstoffatome sind in Enstatit gebunden. Der Anteil des in Enstatit gebunden Sauerstoffs ist $3f_{Ens}\epsilon_{Si}$. Der Anteil des Sauerstoffs, welcher in Korrund gebunden ist, ist mit dem Beitrag $\frac{3}{2}f_{cor}\epsilon_{Al}$ berücksichtigt. Außer CO kommt Sauerstoff in H₂O und SiO mit großer Häufigkeit vor. Die Gleichgewichtsbedingung für siliziumhaltige Komponenten ist in Gl. (1.63) dargestellt. Das häufigste Gasmolekül, das Si enthält, ist SiO. In jedem Forsterit und in jedem Enstatit ist auch ein Siliziumatom vorhanden. In Gl. (1.64) steht die Gleichgewichtsbedingung für magnesiumhaltige Verbindungen. Zwei Magnesiumatome sind in Forsterit gebunden und eins ist in Enstatit vorhanden. Das häufigste Mg–haltige Gas ist Magnesiumgas.

Aus den Gleichungen (1.62)-(1.63), (1.57) und (1.60) lassen sich die Kondensationsgrade f_{For} und f_{Ens} unter Gleichgewichtsbedingung bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur ableiten. Dabei werden die Aktivitäten gleich Eins gesetzt. Wenn der Kondensationsgrad

einer Staubsorte kleiner als Null wird, existiert diese Staubsorte in diesem Temperaturbereich nicht. Dann werden in den Gleichungen (1.62)-(1.63) die jeweiligen Kondensationsgrade auf Null gesetzt.

Kondensation aus der Gasphase

Die Kondensation einiger Staubsorten hat einen wesentlichen Einfluss auf die Absorbtionseigenschaften der Materie. In den Scheibenbereichen, in denen Kondensationsprozesse stattfinden, bilden sich charakteristische Plateaus in den Temperaturprofilen. Einen wesentlichen Einfluss auf die Opazität haben die Kondensationsprozesse von Wasserdampf, Korund und Eisen.

Korund

Ca– und Al–Verbindungen kommen zwar deutlich seltener als Silikate oder Eisen vor, sind jedoch sehr wichtig in Bereichen, in denen Temperaturen von über 1400 K herrschen. Da die Ca– und Al–haltigen Minerale bei sehr hohen Temperaturen kondensieren, sind sie wichtige Absorber bei hohen Temperaturen bis etwa 1800 K. In Kapitel 2 werden diese Verbindungen ausführlich beschrieben.

Bei der Simulation der Chemie in Akkretionsscheiben wird als Vertreter dieser Verbindungen Korund (Al₂O₃) berücksichtigt. Die Kondesation aus der Gasphase wird durch die Reaktion

$$2AI + 3H_2O \to Al_2O_{3(s)} + 3H_2$$
(1.65)

verwirklicht. Mit dem Symbol (s)² wird der feste Zustand der Spezies bezeichnet. Die Aktivität des Korundes bei seiner Bildung aus freien Atomen ist

$$a_{\rm cor} = p_{\rm Al}^2 p_{\rm O}^3 \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm cor}}{R_{\rm g}T}\right).$$
(1.66)

Hierin ist die freie Enthalpie durch die Gleichung

$$\Delta G_{\rm cor} = \Delta G_f({\rm cor}) - 2\Delta G_f({\rm Al}) - 3\Delta G_f({\rm O})$$
(1.67)

gegeben. Die Bilanz der Gasphase und der kondensierten Phase im Gleichgewicht wird durch die Gleichung

$$p_{AI} + p_{AIH} + p_{AIOH} + p_{AIO_2H} + 2p_{AI_2O} = (1 - f_{cor})\epsilon_{AI}P_H$$
 (1.68)

²*lat*. "solidus"

beschrieben. Auf der linken Seite der Gleichung stehen die partiellen Drücke der häufigsten Al-haltigen Gasmoleküle. Diese werden aus dem Massenwirkungsgesetzt berechnet.

$$p_{\text{AIH}} = p_{\text{AI}} p_{\text{H}} K_p(\text{AIH}) \tag{1.69}$$

$$p_{\text{AlOH}} = p_{\text{Al}} p_{\text{O}} p_{\text{H}} K_p(\text{AlOH})$$
 (1.70)

$$p_{\text{AlO}_2\text{H}} = p_{\text{Al}} p_{\text{O}}^2 p_{\text{H}} K_p(\text{AlO}_2\text{H})$$
(1.71)

$$p_{Al_2O} = p_{Al}^2 p_O K_p(Al_2O).$$
 (1.72)

Die Gleichgewichtskonstanten werden aus den thermodynamischen Daten der freien Atome bestimmt.

Eisen

Eisen existiert vorwiegend in Form von festem Eisen oder in Gasform als freies Atom bei großen Temperaturen. In der Arbeit von Gail (1998) wurde die Kondensation von Silikaten unter Gleichgewichtsbedingungen untersucht. Die Modelle zeigen, dass Silikate im inneren Bereich der Akkretionsscheiben praktisch nur in Form von Forsterit und Enstatit vorhanden sind. Im Bereich, in dem Eisen kondensiert, werden ausschließlich Mg–haltige Silikate gebildet. Daher kommt Eisen in den inneren Bereichen der Akkretionsscheibe vorwiegend in metallischer Form vor.

Die Reaktion, die die Kondensation von Eisen aus der Gasphase beschreibt, ist

$$Fe \rightarrow Fe_{(s)},$$
 (1.73)

wobei der Index (s) den festen Zustand von Eisen bezeichnet. Die Aktivität und die Massenwirkungsbilanz sehen folgendermaßen aus:

$$a_{\rm iro} = p_{\rm Fe} K_p({\rm Fe}) \tag{1.74}$$

$$(1 - f_{\rm iro})\,\epsilon_{\rm Fe}P_{\rm H} = p_{\rm Fe}\,. \tag{1.75}$$

Hierin ist f_{iro} der Kondensationsgrad von Eisen und ϵ_{Fe} ist die Häufigkeit von Eisen. Die Gleichgewichtskonstante ist durch $K_p(iro) = \exp(-\Delta G(iro)/(R_gT))$ definiert. Hier ist nur atomares Eisen in Gasform berücksichtigt. Alle andere eisenhaltigen Spezies in Gasform sind nicht häufig und haben keinen Einfluss auf die Scheibenstruktur. Die Kondensation von Eisen hat einen Einfluss auf die Opazität der Materie und damit auch auf die Struktur der Scheibe.

Wasser

Ein weiterer wichtiger Prozess, welcher einen wesentlichen Einfluss auf die Scheibenstruktur hat, ist die Kondensation des Wassereises. Alle Partikel, die sich hinter der Eisgrenze befinden, sind mit einer Eisschicht überzogen. Das Wassereis kondensiert als erstes von allen wichtigen Kondensaten bei Temperaturen von etwa 150 K. Die Kondensation geschieht durch die Reaktion

$$H_2 O \to H_2 O_{(s)} \,. \tag{1.76}$$

Die Aktivität des Wassereises ist

$$a_{\text{ice}} = p_{\text{H}_2\text{O}}K_p(\text{ice}). \tag{1.77}$$

Hierbei ist die Gleichgewichtskonstante $K_p(\text{ice}) = \exp(-\Delta G(\text{ice})/(R_g T))$. Aus der Gleichgewichtsbedingung zwischen der Gasphase und der kondensierten Phase folgt

$$(1 - f_{ice}) \epsilon_{O,gas} P_{H} = p_{H_2O}.$$
 (1.78)

Hierbei ist f_{ice} der Kondensationsgrad von Eis und $\epsilon_{O,gas}$ ist die Häufigkeit des Sauerstoffs in Gasform. Sie wird genauso definiert, wie in Gl. (1.62):

$$\epsilon_{\text{O,gas}} = \epsilon_{\text{O}} - \epsilon_{\text{C}} - (4f_{\text{For}} + 3f_{\text{Ens}})\epsilon_{\text{Si}} - \frac{3}{2}f_{\text{cor}}\epsilon_{\text{Al}}.$$
(1.79)

Wenn Wassereis vorhanden ist, wird $a_{ice} = 1$. Aus den oben beschriebenen Gleichungen wird der Kondensationsgrad des Wassereises berechnet.

1.2.3 Verdampfung und Wachstum der Staubpartikel

Wenn Material aus dem interstellaren Medium in warme Bereiche der Akkretionsscheibe oder der kollabierenden Wolke eingemischt wird, beginnt das ursprüngliche Material sich zu verändern. Solche Prozesse, wie Verdampfumg, Kristallisation und Kondensation, haben einen merklichen Einfluss auf die Opazitätseigenschaften der Materie.

Der Wachstumsprozess von Staubkörnern wird durch komplizierte chemische Reaktionen mit der Gasphase verursacht. Dieser Vorgang wird durch Stöße der Gasteilchen mit der Oberfläche der Partikel realisiert. Ein Teil der Gasteilchen wird adsorbiert, der andere wird in die Gasphase zurückgestreut. Der adsorbierte Teil der Gaspartikel kann zu neuen Grundbausteinen der Verbindungen werden. Unter dem Grundbaustein einer Verbindung versteht man eine Gruppe von Atomen, die der chemischen Formel der Verbindung entspricht.

Der Wachstumsprozess ist normalerweise ein komplizierter Vorgang mit mehreren Reaktionen. Bei Oberflächenreaktionen existiert oft eine ratenbestimmende Reaktion. Diese Rate beschreibt den langsamsten Prozess, welcher bei der Entstehung des Grundbausteins abläuft. Genau dieser Prozess bestimmt dann die gesamte Geschwindigkeit des Wachstumsvorganges. Die Ablagerung von SiO aus der Gasphase an der Teilchenoberfläche ist z. B. ratenbestimmend beim Wachstumsvorgang von Forsterit (Nagahara und Ozawa 1996). Verdampfungs– und Wachstumsprozesse werden im Labor untersucht. Dabei wird die Größe α , welche die Wahrscheinlichkeit beschreibt, dass bei einem Stoß mit einem Gasmolekül der ratenbetimmende Schritt erfüllt wird, gemessen.

Bei einem Wachstumsprozess ist die Wachstumsrate pro Flächenelement und pro Zeiteinheit durch

$$J_{\rm w} = \alpha \, n \, v_{\rm th} \tag{1.80}$$

bestimmt. Hierin ist *n* die Teilchendichte des Gases, welche in dem ratenbestimmenden Reaktionsschritt auftritt. Diese Gasspezie wird als Wachstumsspezie bezeichnet. Die thermische Geschwindigkeit ist

$$v_{th} = \sqrt{\frac{k_{\rm B}T}{2\pi m}}, \qquad (1.81)$$

wobei *m* die Masse der Wachstumsspezie ist. Wenn sich ein thermodynamisches Gleichgewicht einstellt, dann sind die Verdampfungs– und Wachstumsraten gleich. Dann gibt es ein detalliertes Gleichgewicht zwischen Vorwärts– und Rückwärtsreaktion: $J_v = J_w$. Dabei wird die Teilchendichte der Wachstumsspezies im Gleichgewicht ratenbestimmend. Der Verdampfungskoeffizient α_v ist gleich dem Wachstumskoeffizient α im thermodynamischen Gleichgewicht. Die Koeffizienten α werden meistens in Verdampfungsexperimenten gemessen.

Die Verdampfungsrate in Form von Gl. (1.80) gilt auch für die Staubpartikel, die nicht im Gleichgewicht mit der Gasphase sind. In diesem Fall stellt sich ein Gleichgewicht zwischen einem Staubpartikel und den Gasmolekülen ein, die von der Oberfläche dieses Staubteilchens verdampft wurden.

Wie effektiv der Verdampfungsprozess abläuft hängt von der Geometrie und der Größe der Teilchen ab. Wenn Partikel kugelförmig sind, sind ihre geometrischen Charakteristiken derart, dass ihre Volumen V_s oder Oberflächen A_s leicht zu bestimmen sind:

$$A_{\rm s} = 4\pi a^2 \tag{1.82}$$

$$V_{\rm s} = \frac{4\pi}{3}a^3.$$
(1.83)

Hier ist a der Radius eines Partikels.

Die Änderung der Anzahl der Grundmoleküle N in einem Partikel pro Zeiteinheit ist

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = A_{\mathrm{s}} \left(J_{\mathrm{w}} - J_{\mathrm{v}} \right). \tag{1.84}$$

Für eine Verbindung mit dem Atomgewicht A und der Massendichte ρ_s ist das Volumen des Grundmoleküls durch

$$V_{\rm m} = \frac{A \, m_{\rm H}}{\rho_{\rm s}} \tag{1.85}$$

definiert. Die Änderung der Anzahl von Teilchen ist dann $dN = dV_s/V_m$. Daraus folgt der Ausdruck für die temporäre Radiusänderung:

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_{\mathrm{m}} \left(J_{\mathrm{w}} - J_{\mathrm{v}} \right). \tag{1.86}$$

Diese Gleichung beschreibt Verdampfungs- und Wachstumsprozesse jeder Staubsorte in Akkretionsscheiben.

1.2.4 Ratenterm in Transport–Diffusionsgleichung

In diesem Abschnitt werden die Ratenterme aus Gl. (1.20) für Wachstums- und Verdampfungsprozesse beschrieben. Bei der Modellierung der komplizierten chemischen Vorgänge in einem Staubgemisch werden unterschiedliche Partikelgrößen berücksichtigt. Die ursprüngliche Teilchengrößenverteilung wird bei steigenden Temperaturen durch Verdampfungs- und Kondensationsprozesse verändert.

Um einen großen Bereich der Partikelgrößen zu untersuchen, werden einige Annahmen getroffen. Alle Teilchen gleicher Zusammensetzung werden nach ihren Größen in Gruppen eingeteilt. Auf diese Weise werden statt unendlich vieler diskreter Radiuswerte lediglich bestimmte Radiusintervalle betrachtet. So gehören zu einer Gruppe alle Partikel mit gleicher chemischer Zusammensetzung und mit Radien im Intervall $(a_i, a_{i+1}]$. Der Index *i* entspricht der Nummer eines Intervalls und kann die Werte i = 1, ..., I annehmen. Es gibt insgesammt *I* Radiusintervalle. Die Radien steigen vom minimalen Wert a_1 bis zum maximalen Wert a_{I+1} . Aus Gl. (1.20) werden die Konzentrationen c_i der Teilchen in einem Radiusintervall $(a_i, a_{i+1}]$ bestimmt. Die gesamte Teilchendichte einer Staubsorte n_s , sowie die gesamte Oberfläche A_a und das gesamte Volumen V_a werden durch das Summieren über alle Radiusintervalle bestimmt:

$$n_{\rm s} = n \sum_{i=1}^{I} c_i$$
 (1.87)

$$A_{\rm s} = n \sum_{i=1}^{I} c_i 4\pi a_{i+0.5}^2$$
(1.88)

$$V_{\rm s} = n \sum_{i=1}^{I} c_i \frac{4\pi}{3} a_{i+0.5}^3 \,. \tag{1.89}$$

Bei sehr kleinen Partikeln haben die Geschwindigkeiten und Diffusionskoeffizienten aus Gl. (1.20) gleiche Werte wie die Gasspezies.

Verdampfung

Um die Verdampfungsrate zu bestimmen, wird die Radusveränderung innerhalb eines Zeitintervalls $\Delta \tau$ verfolgt. Durch die Verdampfung nimmt der Teilchenradius ab: $\dot{a} < 0$. Das bedeutet, wenn ein Teilchen zum Zeitpunkt *t* einen Radius im Bereich $(a_{i+1}, a_{i+1}+|\dot{a}| \Delta t]$ hatte, dann wird der Radius zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ um denBetrag $|\dot{a}| \Delta t$ kleiner und sein Wert liegt im Intervall $(a_i, a_{i+1}]$. D. h., dass im Zeitraum Δt die Anzahl der Partikel im Radiusintervall $(a_i, a_{i+1}]$ um einen Betrag von κc_{i+1} zugenommen hat. Hierbei ist κ der Bruchteil der Partikel aus dem Radiusintervall $(a_{i+1}, a_{i+2}]$, welcher durch die Verdampfung einen Radius aus dem nächst kleineren Radiusintervall $(a_i, a_{i+1}]$ bekommt.

$$\kappa = \frac{|\dot{a}|\,\Delta t}{a_{i+2} - a_{i+1}}\,.\tag{1.90}$$

Entsprechend verliert das Intervall $(a_i, a_{i+1}]$ an das Intervall $[a_{i-1}, a_i]$ eine Teilchenzahl von $-c_i \kappa$. Wenn $\Delta a_i = a_{i+1} - a_i$, ist, dann ist der Ratenterm aus Gl. (1.21) (siehe Gail 2001)

$$\frac{R_i}{n} = \left(\frac{c_{i+1}}{\Delta a_{i+1}} - \frac{c_i}{\Delta a_i}\right) \left|\frac{da}{dt}\right|.$$
(1.91)

Die Verdampfung eines Partikels mit dem Index i = 1 bedeutet die vollständige Verdampfung und damit den Verlust dieses Partikels. Die Partikel mit dem Index i = I haben den maximal möglichen Teilchenradius und können daher keinen Gewinnterm (erste Term in Gl. (1.91)) mehr erfahren, dieser ist bei i = I wegzulassen.

Wachstum

Im Fall der Wachstumsprozesse werden die gleichen Überlegungen angestellt, wie im Fall der Verdampfung. Beim Wachstum ist $\dot{a} > 0$ und der Ratenterm sieht folgendermaßen aus:

$$\frac{R_i}{n} = \left(\frac{c_{i-1}}{\Delta a_{i-1}} - \frac{c_i}{\Delta a_i}\right) \left|\frac{da}{dt}\right|$$
(1.92)

Der erste Term entfällt im Fall i = 1, wenn keine Entstehung neuer Keime möglich ist. Dann sieht die Transport–Diffusionsgleichung im eindimensionalen Fall (1.21) folgendermaßen aus:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_{r,i}\frac{\partial c_i}{\partial r} = \frac{1}{rnh}\frac{\partial}{\partial r}rnhD_i\frac{\partial c_i}{\partial r} + \begin{cases} \left(\frac{c_{i-1}}{\Delta a_{i-1}} - \frac{c_i}{\Delta a_i}\right)\frac{da}{dt} & \text{für } \dot{a} > 0\\ \left(\frac{c_i}{\Delta a_i} - \frac{c_{i+1}}{\Delta a_{i+1}}\right)\frac{da}{dt} & \text{für } \dot{a} < 0 \end{cases}$$
(1.93)

Hierbei sind *r* der radiale Abstand vom Zentrum der Akkretionsscheibe und *h* die Scheibenhöhe. Der Ratenterm koppelt die Konzentrationen aus den Radiusintervallen *i*, *i* – 1 und *i*, *i* + 1 ausgenommen die Grenzfälle *i* = 1 und *i* = *I*. In der Einzonennäherung wird die gemittelte temporäre Ableitung \tilde{a} benutzt.

1.2.5 Tempern der Silikate

Kristallisationsprozesse verändern wesentlich die Opazitätseigenschaften der Materie. Aus diesem Grund ist dieser Prozess wichtig bei der Modellierung der Akkretionsscheiben. Der Staub kommt aus dem interstellaren Medium in amorpher Form. Wenn die Festkörper in warme Bereiche der Scheibe kommen, beginnen Kristallisationsprozesse. Kristallisationsprozesse, welche aufgrund von Erwärmung auftreten, heißen Tempern (engl. annealing).

Der Kristallisationsvorgang hat eine starke Abhängigkeit von der Temperatur im Festkörper. Das Wachstum der kristallisierten Bereiche in amorphen Teilchen beginnt auf den Keimen der Kristallisation. Bei der Erwärmung werden Schwingungen angeregt. Dank der erhöhten thermischen Energie beginnen Umlagerungen einzelner Atome und Atomgruppen. Durch diese Umstrukturierungen wachsen auf den Keimen Schichten des kristallinen Materials.

Tempern wird in Laborexperimenten untersucht. Experimentell werden Aktivierungenergien E_a , die bei der Umlagerungen der Atomen oder Atomgruppen überwunden werden müssen, bestimmt.

Das hier verwendete Modell von Kristallisationsprozessen ist in Gail (2001) beschrieben. Laut angenommenen Näherungen hängen die optischen Eigenschaften der Materie nur vom Kristallisationsgrad x_{cr} ab, welcher den Volumenanteil an kristallinem Material in amorphen Teilchen bezeichnet. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass der kristalline Bereich und das Grundmolekül würfelförmig sind. Das Wachtum des kristallinen Bereiches ist durch folgene Zeitskala bestimmt:

$$\frac{1}{\tau_{\text{temp}}} = \nu \exp\left(-\frac{E_a}{k_{\text{B}T}}\right).$$
(1.94)

Die Zeit τ_{temp} wird durch die charakteristische Frequenz ν bestimmt, mit der ein Atom im Festkörper auf einen benachbarten, freien Gitterplatz wechselt. Hierzu wird die Aktivierungsenrgie E_a benötigt.

Die zeitliche Änderung des Volumens des kristallisierten Bereichs (siehe Gail 1998) ist

$$\frac{\mathrm{d}V_{\mathrm{cr}}}{\mathrm{d}t} = V_{\mathrm{m}} \cdot 6 \left(\frac{V_{\mathrm{cr}}}{V_{\mathrm{m}}}\right)^{2/3} \cdot \nu \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{a}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right).$$
(1.95)

Diese Gleichung beschreibt das Wachstum eines kristallisierten Bereiches ohne Berücksichtigung, dass sich mehrere Kristallisationsgebiete überlappen können. Der Faktor 6 ist die Anzahl der Würfelflächen. Der Kondensationsgrad eines Staubteilchens zeigt, welcher Volumenanteil in kristalliner Form vorhanden ist, und ist durch

$$x_{\rm cr} = \min\left(\sum_{i} \frac{V_{i,\,\rm cr}}{V_{\rm m}}, 1\right) \tag{1.96}$$

im Rahmen des hier gezeigten Modells zu berechnen, wobei $V_{i, cr}$ das Volumen des kristallisierten Bereichs ist, welcher an einem einzelnen Keimzentrum *i* gewachsen ist.

Die zeitliche Veränderung des Kondensationsgrades während der Wachstumsphase des Kristallisationsbereiches wird durch

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} 6 \cdot n_{\mathrm{cr}}^{1/3} x_{\mathrm{cr}}^{2/3} \nu \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{a}}}{k_{\mathrm{B}}T}\right) \text{ wenn } x_{\mathrm{cr}} < 1\\ 0 \text{ sonst} \end{cases}$$
(1.97)

ausgedrückt. Hierbei ist n_{cr} die Anzahl der Keimzentren pro Siliziumatom. Der Prozess der Kristallisation läuft mit der charakteristischen Zeitskala

$$\tau_{\rm cr} = V_{\rm cr} \left| \frac{\mathrm{d}V_{\rm cr}}{\mathrm{d}t} \right|^{-1} \tag{1.98}$$

ab. Der Ratenterm in der Transport–Diffunsionsgleichung (1.20) sieht dann folgendermaßen aus:

$$\frac{R_{\rm am}}{n} = -\frac{R_{\rm cr}}{n} = \frac{c_{\rm am}}{\tilde{\tau}_{\rm cr}} \,. \tag{1.99}$$

Hierin ist $\tilde{\tau}_{cr}$ die über die vertikale Koordinate gemittelte charakteristische Zeitskala. Diese Gleichung beschreibt die vereinfachte Vorstellung des Kristallisationsprozesses, bei welchem der Staub entweder nur im amorphen oder im kristallinen Zustand vorhanden ist.

1.2.6 Opazität

Chemische Umwandlungen der Staub– und Gaskomponenten führen zu Opazitätsänderungen der Materie. Die hier beschriebenen Prozesse sind im Modell von Gail (2001) simuliert. In diesem Modell werden chemische Umwandlungen konsistent mit einem Scheibenmodell in der Einzonnennähreung simuliert. Hier wird gezeigt, welchen Einfluss diese chemischen und mineralogischen Umwandlungen auf die Scheibenstruktur haben.

Im von Gail entwickelten Modell werden die verwendeten Opazitäten mit Hilfe der Mie-Theorie (Mie 1908) berechnet (pers. Mitteilung). Die Größenverteilung der Staubpartikel am äußeren Rand der Akkretionsscheibe entspricht der MRN–Verteilung (Mathis u. a. 1977). Die gesamte Opazität wird als Summe der Opazitäten der einzelnen Gas– und Staubkomponenten bestimmt:

$$\kappa_{\rm R} = \kappa_{\rm gas} + \sum_{i} f_i \kappa_{i,\rm s} \,. \tag{1.100}$$

Hier ist $\kappa_{i,s}$ der Massenextinktionskoeffizient bei vollständiger Kondensation des Elements, das den Kondensationsgrad bestimmt, und f_i der Anteil, der tatsächlich kondensiert ist. Bei den Silikaten unterscheidet man zwischen dem kristallinen und dem amorphen Zustand

$$\kappa_{\rm R,Sil} = f_{\rm cr} \, \kappa_{\rm R,cr} \, + \, (1 + f_{\rm cr}) \, \kappa_{\rm R,am} \, . \tag{1.101}$$

Hierbei ist f_{cr} der Anteil der Silikate, der in kristalliner Form vorhanden sind. Die Funktionen $\kappa_{R,am}$ und $\kappa_{R,cr}$ sind die RosseLandmittel des Massenextinktionskoeffizienten des amorphen bzw. kristallisierten Staubs.

Einen wesentlichen Einfluss auf die Gesamtopazität hat auch Kohlenstoff. Diese Staubkomponente ist sehr häufig in den Akkretionsscheiben und ist damit nicht vernachlässigbar. Kohlenstoff kommt im amorphen Zustand aus dem interstellaren Medium und wird beim Einmischen in wärmere Bereiche der Scheibe aufgrund der Reaktion mit OH–Radikalen zerstört. Dieser Prozess wird ausführlich im Kapitel 3 beschrieben.



Abbildung 1.1: Kondensationsgrade der Staubkomponenten in einer Akkrteionsscheibe. Die obere Grenze der gefüllten Linie zeigt das Temperaturprofil. Die Temperaturskala ist auf der rechten Seite. Alle dargestellten Größen sind als Funktionen des radialen Abstandes zum Protostern dargestellt. Das Modell von Gail (2004) wurde in dieser Arbeit mit der Akkretionsrate $\dot{M} = 10^{-7} M_{\odot} a^{-1}$ neu berechnet. Dieser Wert der Akkretionsrate wird bei $\approx 5 \cdot 10^5$ a nach dem zweiten Kollaps erreicht.



Abbildung 1.2: Opazität als Funktion des radialen Abstandes in der Akkretionsscheibe. Mit den dünnen Linien sind die Beiträge der verschiedenen Staubsorten zur Gesamtopazität gekennzeichnet. Mit der dicken Linie ist die Gesamtopazität inklusive Molekülbeiträge markiert. Modell von Gail (2004).

Die Abb. 1.1 und 1.2 zeigen ein Modell einer stationären Akkretionsscheibe um einen Protostern mit $M = 1M_{\odot}$ und einer Akkretionsrate $\dot{M} = 10^{-7} M_{\odot} a^{-1}$. Diese Akkretionsrate entspricht etwa einem Zeitpunkt von $5 \cdot 10^5$ a nach dem zweiten Kollaps (siehe Kapitel 2). Die Bildung von Planetesimalen und Planeten beginnt im inneren Bereich der Akkretionsscheibe $(r \leq 1 \text{ AU})$ etwa zu diesem Zeitpunkt. Die Zusammensetzung des Materials der Akkretionsscheibe scheibe entspricht etwa der Zusammensetzung des Materials, aus dem Planetesimale gebildet werden.

In Abbildung 1.1 sind die Kondensationsgrade der unterschiedlichen Staubkomponenten als Funktion des radialen Abstandes zum Zentrum präsentiert. Die obere Linie der gefüllten Fläche zeigt das Temperaturprofil. Auf dieser Abbildung ist zu erkennen, wie Verdampfung und Kondensation die thermische Struktur der Scheibe beeinflussen. In den Bereichen der Scheibe, in welchen Staub verdampft, bilden sich breite Plateaus im Temperaturprofil. So bildet sich das erste Plateau (von außen kommend) aufgrund der Eisverdampfung im Abstand 7-10 AU von dem Protostern. Die Eisenverdampfung führt zur Bildung eines weiteren Plateaus im Abstand von etwa 0.2 bis etwa 0.5 AU vom Zentrum. Die Verdampfung der thermisch stabilsten Staubkomponente Korund beeinflusst den Temperaturverlauf im Bereich von etwa 0.1 bis 0.2 AU vom Zentrum.

Abb. 1.2 zeigt den Verlauf der gesamten Opazität (in der Abbildung ist dies mit der dicken Linie markiert) in einer Akkretionsscheibe. Hierbei sind auch die einzelnen Beiträge der jeweiligen Staubkomponenten dargestellt. In der Abbildung sind die Beiträge zur gesamten Opazität von Eis, Kohlenstoff, von amorphen und kristallinen Silikaten, sowie von Eisen und Korund zu sehen. Ab einem Abstand von 6 AU ist Wassereis der wichtigste Absorber. Sein Beitrag zur Gesamtopazität dominiert in den äußeren Schichten der Akkretionsscheibe. Im Bereich von etwa 1AU bis 6 AU von dem Zentrum machen sich die Beiträge von Silikaten und Kohlenstoff bemerkbar. In den inneren Bereichen der Scheibe sind Eisen und Korund die wichtigsten Staubabsorber in der Scheibe. Wenn Korund verdampft, wird die Opazität ausschließlich durch Gaseigenschaften bestimmt.

Chemische Prozesse spielen eine wichtige Rolle bei der Entwicklung der Akkretionsscheiben. Die hier dargestellten Rechnungsmethoden werden in den folgenden Kapiteln verwendet.
Kapitel 2

Kalzium– und aluminiumreiche Einschlüsse

2.1 Einleitung

In diesem Kapitel wird einer der ältesten Bestanteile des Sonnensystems untersucht — Kalzium– und aluminiumreiche Einschlüsse¹. Ausführliche Informationen über diese Minerale liefern vorwiegend Studien der Chondriten, in denen die Ca– und Al–reiche Einschlüsse mit bescheidenen 5% zu der Gesamtmasse beitragen. Diese hellen Einschlüsse mit unregelmäßiger, fleckenartiger Struktur, die in der Chondritenmatrix leicht zu erkennen sind, liefern wichtige Erkenntnisse über die frühe Entwicklungsphase unseres Sonnensystems.

Intensive Forschung der Meteoritenkunde zeigt, dass die Ca– und Al– reichen Einschlüsse die ältesten bekannten Festkörper in unserem Sonnensystem sind. Sie sind das Produkt der Verdampfungs–Rekondensations–Prozesse in einer heißen, reduzierenden Umgebung. Nach ihrer Entstehung schmolzen sie zum Teil mehrmals, was auf einen Materiekreislauf im Entstehungsgebiet hinweist. Die Erkenntnisse, über die wir heute mit modernen Forschungsmethoden verfügen (u. a. SIMS), liefern Informationen über die dynamische Entwicklung des Sonnensystems in der sehr frühen Entwicklungsphase. In dieser Arbeit wird ein Entwicklungsszenario einer kollabierenden Molekülwolke vorgeschlagen. Die Ereignisse, die bei einem Kollaps stattfinden, begünstigen die Entstehung der Ca– und Al–reichen Verbindungen und Ihre Verteilung weit über ihr Entstehungsgebiet hinaus innerhalb von wenigen tausend Jahren.

In dieser Arbeit werden nur einige wichtige Erkenntnisse über CAIs angesprochen. Zu diesem Thema wurden mehrere detaillierte Arbeiten geschrieben, die die wichtigsten Aspekte der Forschung streifen. Eine große Übersichts zu diesem Thema findet sich in den Arbeiten von Grossman (1980), MacPherson u. a. (1988), Jones u. a. (2000), Ireland und Fegley (2000) und MacPherson u. a. (2005).

¹Hier wird oft die Abkürzung CAIs (von engl. calcium-aluminium-rich-inclusions) verwendet.

Ca– und Al–reiche Einschlüsse enthalten zu einem großen Prozentsatz Zerfallsprodukte von kurzlebigen Isotopen wie ²⁶Al, ⁴¹Ca, ⁵³Mn und ¹⁰Be. Dies bedeutet, dass die CAIs in der früheren Phase der Sonnensystementstehung gebildet wurden. Die genauesten Messungen der Pb-Isotope im CV3–Meteorit Efremovka konnten das Alter von CAIs zu 4567.2 \pm 0.6 Millionen Jahre (Ma) bestimmen (Amelin u. a. 2002). Damit sind die CAIs die ältesten aller bekannten Festkörper in unserem Planetensystem.

Die Größen der Ca– und Al–reichen Einschlüsse variieren zwischen ca. 100 μ m und ca. 2 cm. Große Einschlüsse sind allerdings nur in wenigen Meteoriten zu finden. Die CAIs sind weiß, rosa oder manchmal blau gefärbte Minerale. Diese Objekte bestehen vorwiegend aus Sauerstoffverbindungen und Silikaten von Kalzium, Aluminium, Titan und Magnesium (Grossman 1980). Die Minerale, die unter anderen in den Einschlüssen gefunden werden, sind Spinel (MgAl₂O₄), Melilit (Ca₂Mg_xAl_{2-2x}Si_{1+x}O₇), Hibonit (CaMg_xTi_xAl_{12-2x}O₁₉), Perovskit (CaTiO₃), Korund (Al₂O₃), Gehlenit (Ca₂Al(AlSi)O₇) und Anorthit (CaAl₂Si₂O₈). In der Arbeit von Brearley und Jones (1998) wurden die Minerale aufgelistet und klassifiziert. Die Einschlüsse können als hoch poröse, unregelmässige Strukturen aus winzigen Kristallen oder als ausgedehnte Objekte bis zu einigen Millimetern Größe, die auch manchmal ausgedehnte Objekte in der Meteoritenmatrix bilden, auftreten.

Die CAIs sind am häufigsten in kohligen Chondriten verbreitet. Diese Verbindungen sind fast in allen Meteoriten dieser Klasse zu finden. Sogar im Typ CI wurden CAIs beobachtet (Huss u. a. 1995). Die CI–Mutterkörper stammen aus weit entfernten Bereichen unseres Planetensystems und repräsentieren ursprungliches Material unseres Sonnensystems. Die Präsenz dieser Verbindungen in CI-Meteoriten weist auf eine große räumliche Verbreitung der CAIs in den frühen Entwicklungsphasen der Planetensystems hin. Die Ca– und Al–haltigen Minerale verteilten sich nicht gleichmässig in unserem Planetensystem. Die CV–Klasse der Meteoriten beinhaltet den größten Anteil an den Ca– und Al–reichen Verbindungen. Dabei treten die größten Einschlüsse (1–2 cm) vorwiegend in CV3–Chondriten auf (MacPherson u. a. 2004). Teilweise zeigen diese Verbindungen Spuren von sekundärer Mineralisierung. Die Gründe der sekundären Prozesse in CAIs sind bis heute ein aktuelles Forschungsgebiet.

Die Bedingungen, unter denen die Minerale entstehen, können aus den Isotopenanomalien hergeleitet werden. Die Anwesentheit der Zerfallsprodukte des Be¹⁰–Isotopes weist darauf hin, dass die CAIs in der Nähe des Protosterns gebildet wurden. Diese Isotope bilden sich, wenn energetische Teilchen von dem Stern Sauerstoff– oder Stickstoffatomkerne bombardieren. Das Verhältniss²⁶Al/²⁷A repräsentiert das Alter der Ca– und Al–haltigen Minerale. Eine Auswertung dieses Verhältnisses liefert dabei zwei Häufungspunkte, einen bei ²⁶Al/²⁷A = $4.5 \cdot 10^{-5}$ (MacPherson u. a. 2005) oder ²⁶Al/²⁷A= $5.23 \pm 0.13 \cdot 10^{-5}$ (Jacobsen u. a. 2008), und einen bei ~0. Der zweite Wert weist auf sekundäre Prozesse wie Schmelzen und Rekondesation, die bei manchen Mineralen in späteren Entwicklungsphasen stattfanden, hin. Die Schwankungen des ersten Wertes limitieren die Bildungszeit der CAIs auf max. 20 ka (Jacobsen u. a. 2008).

Die CAIs haben noch eine wichtige Besonderheit. Die Isotopenrelationen ¹⁶O/¹⁷O und ¹⁶O/¹⁸O (Clayton u. a. (1977); McKeegan u. a. (1998); Fagan u. a. (2001)) haben gleiche Werte in allen Ca– und Al–reichen Einschlüssen. Diese einheitliche Verteilung des ¹⁶O lässt den Schluss ziehen, dass alle CAIs in demselben Bereich in der Protosternumgebung gebildet worden sind.

In dieser Arbeit wird die chemische Entwicklung der CAIs während der Kollapsphase verfolgt. In der Arbeit von Grossman (1972) sind die Gleichgewichtsrechnungen durchgeführt, die zeigen, dass die meisten Ca– und Al–haltigen Minerale durch Kondensation in heißer Gasumgebung entstanden sind.

In dieser Arbeit wird auch angenommen, dass die CAIs aus der Gasphase in der Hochtemperaturumgebung auskondensieren. Die schnellen Strömungen, die während eines Kollapses entstehen, transportieren dann die neu gebildeten Teilchen mit rasanter Geschwindigkeit aus den heißen Bereichen zu "sicheren", kühlen Regionen. Die Strömungen können die Partikel erneut in die heißen Gebiete bringen. In diesem Fall werden sie dann verdampfen und rekondensieren. Die Rechnung zeigt, dass die Verbreitung der Ca– und Al–haltigen Minerale während der Kollapsphase bis in die äußeren Teile des Sonnensystems nur wenige tausend Jahre braucht.

2.2 Kollapsmodell

In dieser Arbeit werden zwei Kollapsmodelle verwendet. Bei dem einen Modell handelt es sich um ein implizites Modell (Tscharnuter u. a. 2009), das andere Modell ist ein explizites Modell (Schönke und Tscharnuter 2011). Für die beide Modelle wurden Rechnungen zur Entstehung der CAIs gemacht. Da die Modelle gut in den oben zitierten Arbeiten beschrieben sind, sollen sie hier nur kurz zusammengefasst werden. Hierbei sollen zunächst die Teile beschrieben werden, die für beide Modelle gleich sind.

Der Kollaps wird mit einer gitterbasierten Methoden berechnet. Dabei ist das System kugel- und äquatorsymmetrisch. Die Annahmen der Symmetrien erlauben es, gut aufgelöste zweidimensionale Rechnungen durchzuführen. Die Dynamik der Materie wird dabei deutlich durch die Gravitation beeinflusst. In beiden Modellen spielt die Eigengravitation eine große Rolle. Die Modelle beinhalten wichtige und komplizierte hydrodynamische Prozesse. Die Materie und die Energie werden durch Advektion (Strömungen) transportiert. Dabei werden die Erhaltungsgleichungen zusammen mit dem Strahlungstransport gelöst. Im expliziten Modell sind die Gleichungen aus dem strahlungshydrodynamischen Modell von Krumholz u. a. (2007) verwendet. Die in dem impliziten Modell verwendeten Gleichungen sind in der Arbeit

Tscharnuter (1987) beschrieben.

In den Modellen werden die besonders wichtigen Staub– und Molekülspezies mitberücksichtigt, um möglichst realistische Zustandsgleichung und Opazitäten zu gewährleisten. Zu den wichtigsten Substanzen gehört natürlich molekularer Wasserstoff, bei welchem ab Temperaturen von etwa 80K die inneren Freiheitsgrade aktiviert werden. Mit steigender Temperatur (bis etwa 500K) werden mehr und mehr Rotationsniveaus angeregt, was zum Anstieg der spezifischer Wärme führt. Die spezifische Wärme ihrerseits beeinflusst den Adiabatenexponenten. Ab Temperaturen über 1500K findet Wasserstoffdissoziation statt. In den Kollapsmodellen existiert der Wasserstoff in zwei Formen: Orthowasserstoff (Kernspins sind paralell) und Parawasserstoff (Kernspins sind antiparallel). Das Verhältnis zwischen den beiden Formen des Wasserstoffs hat einen wesentlichen Einfluss auf die spezifische Wärme.

Der Strahlungstransport und entsprechend die Energiebilanz wird stark von der Opazität der Materie beeinflusst. Der Strahlungsfluss wird über alle Wellenlängen integriert. In den Modellen werden viele effektive Strahlungsabsorber berücksichtigt. Bis zu einer Temperatur von etwa 150 K ist das Wassereis der wichtigste Absorber, weil die Staubteilchen mit Wassereis überzogen sind. Bei höheren Temperaturen sublimiert das Eis und gibt dabei die Staubpartikel frei. Staub besteht hauptsächlich aus Silikaten. Ab Temperaturen größer als 1400 K verschwinden auch die Silikate und es bleiben nur Moleküle übrig. Die wichtigsten sind die Gase H₂, OH, H₂O und CO. Wenn die Temperaturen weiter steigen, kommt es zu Wasserstoffionisation. Dabei werden H⁻ und Elektronen zu starken Absorbern. Die Opazitäten für allen beschriebenen Absorber sowie die Zustandsgleichung werden in einer zweidimensionalen Spline– Interpolation als Funktion der Dichte und Temperatur aus Tabellen interpoliert.

Der Drehimpulstransport spielt eine wichtige Rolle für die Entwicklung eines rotierenden Systems. Der genaue Mechanismus des Drehimpulstransportes ist aber nicht bekannt. In den erwähnten Arbeiten sorgt die turbulente Viskosität für einen effektiven Drehimpulstransport. In diesem Fall wird die β -Näherung ausgewählt (siehe Duschl u. a. 2000). Die β -Viskosität ist eine Verallgemeinerung der α -Viskosität. Sie beschreibt den Impulstransport durch die Turbulenz, die durch die azimutalen Scherströmungen erzeugt wird. Das Modell der β -Viskosität ist besonders vorteilhaft, wenn die Eigengravitation eine große Rolle spielt.

Der Anfangszustand der Molekülwolke ist eine Bonnor–Ebert–Sphäre². Damit die Wolke zu kollabieren beginnt, werden die Anfangsbedingungen so gewählt, dass sie leicht gravitativ instabil wird. Im expliziten Modell wird zu diesem Zweck die Temperatur um einen kleinen Faktor über den kritischen Wert erhöht.

Die Entwicklung der kollabierenden Molekülwolke kann in drei Phasen unterteilt werden (siehe Abb. 2.1). Zunächst kontrahiert die leicht überkritische Bonnor–Ebert–Sphäre. Dieser

²Die Bonnor-Ebert-Sphäre ist ein isotherme Gaskugel mit maximaler Masse, mit welcher sie sich noch im hydrostaischen Gleichgewicht befinden kann.



Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Entwicklungsphasen einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses. Die Entwicklung beginnt mit einer überkritischen Bonnor–Ebert–Sphäre. Zunächst bildet sich der erste hydrostatische Kern (Beginn der Phase 1). Bei weiterer Akkretion wird der Kern instabil, was zur Bildung des zweiten, kompakteren Kerns führen kann. (In der Abbildung sind die Zeitskalen und die Proportionen der Strukturen in der Wolke nicht maßstabsgetreu dargestellt.)

Prozess geht sehr langsam vor sich . Die gesamte 0. Phase dauert ca. 1.2 Freifallzeiten in der Wolke, was 0.16 Ma entspricht. Die Temperatur bleibt niedrig (max. 17 K) während der ganzen Phase.

Die Phase 1 beginnt mit dem 1. Kollaps. Dieses Ereignis entspricht dem Zeitpunkt, wenn die radiale optische Tiefe für alle Winkelrichtungen mindestens 2/3 beträgt. Ab dem 1. Kollaps wird die Zeit auf Null gesetzt, weil die Entwicklung der Molekülwolke erst in Phase 1 interessant wird. In Phase 1 bildet sich der erste hydrostatische Kern.

Bei weiterer Akkretion werden die innere Bereiche weiter erhitzt, was zu Wasserstoffdissoziation führt. Dabei entsteht eine dynamische Instabilität, die zum 2. Kollaps führt. Der 2. Kollaps entspricht dem Zeitpunkt, wenn die maximale Temperatur 2000 K erreicht. In der 2. Phase ist die Bildung des zweiten, kompakten, protostellaren Kerns möglich.

Für die Simulation der Entstehung der CAIs sind nur die späte 1. Phase und die 2. Phase relevant, also dann, wenn Temperaturen erreicht sind, bei denen die Ca– und Al–haltigen Minerale gebildet werden können.

2.2.1 Implizites Modell

Das implizite Verfahren beschreibt einen zweidimensionalen Kollaps mit sphärischen und axialen Symmetrieannahmen (siehe Tscharnuter u. a. (2009)). Das implizite Verfahren erfordert viel Rechenzeit, weil für jeden Zeitschritt große Gleichungssysteme gelöst werden müssen. Bei den Kollapsrechnungen ist dieser Aufwand gerechtfertigt, denn viele physikalische und chemische Prozesse, die während eines Kollapses ablaufen, geschehen mit rasanter Geschwindigkeit, was zur Folge hat, dass die Zeitschritte in der Simulation kleiner werden. Das implizite Verfahren hat den Vorteil, dass es auch große Zeitschritte erlaubt und damit die Rechenzeit beschleunigt. Alle Variablen werden in Form von Legendre–Polynomen (bis 27 Koeffizienten) dargestellt. In dem Modell, welches hier angewandt wird, ist der Viskositätsparameter $\beta = 10^{-2}$.

Die für die Entwicklung der Ca– und Al–haltigen Minerale bedeutenden Größen sind in Abb. 2.2-2.4 als Funktion der räumlichen Koordinaten zu verschiedenen Zeitpunkten $(1.52 \cdot 10^3 a, 1.17 \cdot 10^3 a, 2.37 \cdot 10^3 a und 2.82 \cdot 10^3 a seit dem 1. Kollaps) abgebildet. Hier werden die Entwicklungsprofile der interessierenden Größen in der späten Phase 1 gezeigt, weil die Ca– und Al–haltigen Verbindungen erst zu diesem Zeitpunkt entstehen.$

Die Entwicklung der Massendichte während des protostellaren Kollapses ist in der Abbildung 2.2 dargestellt. Der Temperaturverlauf ist zu verschiedenen Zeitpunkten in Abb. 2.3 präsentiert. In den Abbildungen ist eine dichte, scheibenähnliche Struktur zu erkennen. Das kompakte Gebilde verbreitet sich mit der Zeit. Die Ursache für diese Ausbreitung ist die steigende Temperatur. Wenn die Materie zunächst durch Akkretion erhitzt wird, beginnt der Staub zu verdampfen, was zum Sinken der Opazität führt. Die Verringerung der Opazität läßt die Strahlung in tiefere Bereiche der Wolke vordringen, was die weitere Zunahme der Temperatur verursacht. Die erwärmte Materie verbreitet sich auf diese Weise in die weiter entfernten Bereiche.

Wie in Abb. 2.3 zu erkennen ist, steigt die Temperatur mit der Zeit. Der maximale Wert der Temperatur in der Simulation beträgt 1600 K, was bedeutet, dass die Rechnung kurz vor dem zweiten Kollaps endet. Der heißeste Bereich liegt leicht oberhalb des Wolkenzentrums (zwischen 0 und 1 AU). Das liegt daran, dass die Dichte in diesem Bereich einen etwas niedrigeren Wert hat als im Zentrum. Die Opazität ist also auch niedriger und die Strahlung kann effektiver den Bereich erhitzen. Die hohe Temperatur und Dichte sind besonders günstig für die Produktion der Minerale.

In Abb. 2.4 sind die radiale und vertikale Komponente der Geschwindigkeit aufgetragen. Hier ist zu beachten, dass die Werte der Geschwindigkeit logarithmisch dargestellt sind, das Vorzeichen aber nicht zur Geschwindigkeitspotenz gehört, sondern die Richtung des Geschwindigkeitsvektors anzeigt. Die blaumarkierten Werte entsprechen den negativen Richtungen, die rotmarkierten Werte bezeichnen die positiven Richtungen. Die Abbildung oben zeigt die zeitliche Entwicklung der radialen Geschwindigkeit. Die Materie von außen strömt mit einer großen Geschwindigkeit von bis zu 10⁶ cm/s Richtung Zentrum aufgrund der gravitativen Anziehung. Die Materie im Inneren der kompakten Struktur bewegt sich nach außen. Dadurch entsteht ein Mischungsprozess. Das unveränderte Material aus äußeren Bereichen



Abbildung 2.2: Die Entwicklung der Massendichte in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Tscharnuter u. a. 2009). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen.



Abbildung 2.3: Die Entwicklung der Temperatur in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Tscharnuter u. a. 2009). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen.



Abbildung 2.4: Die Entwicklung der Geschwindigkeit $sign(v) \cdot log_{10}|v|$ für |v| > 1 in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Tscharnuter u. a. 2009). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen. Die Abbildung oben entspricht der radialen Geschwindigkeit. Die Abbildung unten zeigt die Entwicklung der vertikalen Komponente des Geschwindigkeitsvektors. Das Vorzeichen gibt die Richtung des Geschwindigkeitsvektors an.

der Wolke kommt ins heiße Zentrum, wird chemisch verändert und in die äußeren Schichten zurück transportiert.

Im unteren Teil von Abb. 2.4 ist die vertikale Geschwindigkeit dargestellt. Das Vorzeichen bedeutet wieder die Richtung der Geschwindigkeit: rot bedeutet Bewegung in positiver Richtung der z–Achse, blau charakterisiert das einfallende Material. Hier ist zu erkennen, wie sich die Scheibe vergrößert. Von dem Rand der Woke her fällt das Material auf die Scheibe mit einer Geschwindigkeit von bis zu 10⁸ cm/s. Die Scheibe expandiert hingegen mit ähnlich großer Geschwindigkeit. Auf den beiden Abbildungen sind einige Übergangsschichten zu erkennen. Diese entstehen, wenn der Staub verdampft. Die Wärme, die rasant durch die Opazitätslücke transportiert wird, reflektiert am Rand des staubfreien Bereiches, was zur Bildung der stehenden Wärmewellen führt.

2.2.2 Explizites Modell

Bei dem expliziten Lösungsverfahren sind die Zeitschritte aufgrund der numerischen Stabilität durch die Courant–Friedrichs–Lewy–Bedingung begrenzt. Die feine räumliche Auflösung, die hohen Temperaturen und die großen Akkretionsgeschwindigkeiten im Zentralobjekt führen zu sehr kleinen Zeitschritten. Die Rechnungen in diesem Modell gehen jedoch etwas weiter als die mit dem impliziten Modell und liefern Ergebnisse bis zu ca. 100 Jahre nach dem zweitem Kollaps.

In den Abbildungen 2.5-2.6 sind die räumliche Dichte und Temperaturverteilung während der 1. Phase des protostellaren Kollapses abgebildet. Die Größen sind zu den Zeitpunkten 380 a, 580 a, 980 a und 1180 a nach dem ersten Kollaps dargestellt. Bei der Aufnahme zum Zeitpunkt 380 a ist zu sehen, dass die Temperatur mit etwa 10K noch sehr klein bleibt. Im Dichteprofil ist dagegen eine leicht kugelsymmetrische Verdichtung zu sehen. Bei weiterem Kollabieren wird das Material in der Wolke leicht über 300 K erhitzt(siehe die Zeitaufnahme von 580 a.). Das innere Gebilde wird auch etwas kompakter, die Dichte erreicht Werte über 10^{-11} g/cm³. Diese Zeitaufnahmen zeigen zwar die Dynamik der Entwicklung der kollabierenden Wolke, sind aber nicht relevant für die Entstehung der CAIs. Die Temperatur während dieser Kollapsphase ist nicht hoch genug, um zur Bildung der Al- und Ca-haltigen Minerale zu führen. Bei der nächsten Zeitaufnahme zum Zeitpunkt 980 a nach dem ersten Kollaps erreicht die Temperatur Werte über 600 K. Dabei wird der Kern deutlich dichter. Die nächste Zeitaufnahme zeigt schon eine scheibenähnliche Struktur. Die Temperatur steigt über 1000 K, was eine gute Voraussetzung für die Entstehung der CAIs darstellt. Dieser kleine Zeitabschnitt von 380 a bis 1180 a entspricht ungefähr dem ganzen Evolutionsverlauf, der mit dem impliziten Verfahren gerechnet wurde. Die Struktur, die in der Zeitaufnahme von 1180 a sichtbar ist, ähnelt derjenigen, die am Ende der Modellrechnung im impliziten Modell ent-



Abbildung 2.5: Dichteverteilung in räumlichen Koordinaten für 380 a, 580 a, 980 a und 1180 a nach dem ersten Kollaps. Explizites Kollapsmodell (Schönke und Tscharnuter 2011).



Abbildung 2.6: Temperaturverteilung in räumlichen Koordinaten für 380 a, 580 a, 980 a und 1180 a nach dem ersten Kollaps. Explizites Kollapsmodell (Schönke und Tscharnuter 2011).

steht. Die beiden Modelle führen zu einem sehr ähnlichen Zustand vor dem zweiten Kollaps. Das explizite Modell zeigt aber ein deutlich schnelleres Entwicklungsszenarium. Der Endzustand der impliziten Rechnung wird mit dem expliziten Modell ungefähr 1000 a früher erreicht.

In den Abbildungen 2.7-2.11 sind die für die Entstehung der CAIs relevanten Größen in räumlichen Koordinaten zu vier ausgewählten Zeitpunkten, 1380 a, 1425.6 a, 1451.6 a und 1481.6 a, dargestellt. In den Abbildungen ist ein Simulationsabschnitt zu sehen, welcher die Entwicklung der Wolke kurz vor dem zweiten Kollaps (1380 a) und direkt nach dem zweiten Kollaps (1425.6 a, 1451.6 a und 1481.6 a) zeigt. Nach dem zweiten Kollaps bildet sich ein kompakter Kern im Zentrum des Systems — ein Protostern.

Die Abbildungen 2.7 und 2.8 zeigen die räumliche Verteilungen der Massendichte. Die Abb. 2.7 zeigt einen großen und Abb. 2.8 einen kleineren Wolkenausschnitt. Das zentrale Objekt erreicht Dichten von bis zu 10^{-2} g/cm³. Aufgrund der kleinen Größe ist der Stern auf den Abbildungen nicht zu erkennen. Das zentrale Objekt ist für die Entstehung der Ca– und Al–haltigen Minerale nicht von großer Bedeutung, daher werden nur die für die Entstehung der CAIs wichtigen Wolkenausschnitte abgebildet.

In der Abbildung, die einer Zeit von 1380 a nach dem ersten Kollaps entspricht, ist die Struktur der Wolke kurz vor dem zweiten Kollaps zu sehen. Die globale Struktur des ersten Kerns ähnelt der Scheibe. Die maximale Dichte erreicht Werte von bis zu 10^{-3} g/cm³ in der Mitte. Die Scheibe ist aufgrund der Staubverdampfung im Zentrum der Wolke bis ca. 20 AU aufgebläht. Die maximale Temperatur (siehe Abb. 2.9 oben links) beträgt 1500 K. Diese Struktur ist ähnlich zu dem Endzustand des impliziten Modells.

Die weiteren Zeitaufnahmen zeigen die Entwicklung der Wolke nach dem zweiten Kollaps. Die Temperatur steigt weit über 2000 K. Nach dem zweiten Kollaps steigt die zentrale Dichte um mehr als fünf Größenordnungen und die zentrale Temperatur um mehr als eine Größenordnung. Zum Zeitpunkt 1425.6 a nach dem ersten Kollaps (etwa 16 Jahre nach dem zweiten Kollaps) erreicht die Temperatur Werte von 45 000 K, nach 1481.6 a erreicht die Temperatur schon 46 000 K. In Abbildung 2.9 ist der zentrale Bereich mit den hohen Temperaturen abgeschnitten, weil das Entstehungsgebiet der CAIs außerhalb des Zentrums bei deutlich kleineren Temperaturen liegt. Nach der Bildung des zweiten Kerns beginnt die Scheibe zu expandieren. Dabei dehnt sich die Scheibe mehr in Richtung der Rotationsachse aus, wo Materie nicht so dicht ist. Die Wärme kann schneller in optisch dünne Bereiche der Wolke abtransportiert werden. Mit der Zeit vergrößert sich die staubfreie Zone aufgrund der steigenden Leuchtkraft des Sterns. Durch die Zerstörung des Staubs wird das Gebiet, in dem nur Gas vorhanden ist, für die Strahlung durchsichtig, was weiteres Stauberhitzen und die Verdünnung weiterer Schichten verursacht. Damit wächst die thermische Energie der Wolke und die Wolke expandiert weiter und weiter, bis die Scheibenstruktur nicht mehr zu erkennen



Abbildung 2.7: Die Entwicklung der Massendichte in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (1380 a, 1425.6 a, 1451.6 a und 1481.6 a) in räumlichen Koordinaten (Schönke und Tscharnuter 2011). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen. Die Farbskala ist durch den Wert 10^{-10} g/cm³ begrenzt. Die Dichte im Zentrum kann allerdings auch Werte über 0.1 g/cm³ erreichen.



Abbildung 2.8: Die Entwicklung der Massendichte in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Schönke und Tscharnuter 2011). Kleiner Ausschnitt aus dem Zentrum. Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen.



Abbildung 2.9: Die Entwicklung der Temperatur in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Schönke und Tscharnuter 2011). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen.



Abbildung 2.10: Die Entwicklung der radialen Geschwindigkeit in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Schönke und Tscharnuter 2011). Die Zeitpunkte sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen. Das Vorzeichen in der Farbskala bedeutet die Richtung der Geschwindigkeit.



Abbildung 2.11: Die Entwicklung der vertikalen Geschwindigkeit in einer rotierenden Molekülwolke während eines protostellaren Kollapses zu verschiedenen Zeitpunkten (Schönke und Tscharnuter 2011). Die Zeitpunkten sind oberhalb bzw. unterhalb der entsprechenden Abbildungen aufgetragen. Das Vorzeichen in der Farbskala bedeutet die Richtung der Geschwindigkeit.

ist (siehe beide untere Graphen in Abb. (2.7)). Die Akkretionsrate sinkt bei der Expansion, was ein Sinken der Leuchtkraft verursacht. Bei sinkender Leuchtkraft wird die staubfreie Zone kleiner. In dem zentralen Gebiet bildet sich eine neue, kleine Akkretionsscheibe (siehe Abb. 2.7 unten) aus dem Restmaterial.

Die Temperaturstruktur wird durch das Aufblasen der Scheibe ebenfalls drastisch verändert. Wenn der Staub verdampft wird, breitet sich auch das Hochtemperaturgebiet auf Bereiche bis zu 5 AU (siehe Abb. 2.9 bei 1425.6 a) aus. Da die Dichte stark abnimmt, ist die Temperatur am Ende der Rechnung praktisch kugelsymmetrisch verteilt über das ganze verdünnte Gebiet (siehe Abb. 2.9 unten).

Auch bei dieser Kollapsrechnung bilden sich komplizierte Geschwindigkeitsfelder (siehe Abb. 2.10 und 2.11). Die Abbildungen zu den Zeiten von 1380 a und 1425 a ähneln den Strömungen des impliziten Modells am Ende der Rechnung. Auf den weiteren Abbildungen ist die rasante Verbreitung der Materie zu sehen. Nach dem zweitem Kollaps strömt die Materie zunächst in die optisch dünnen Bereiche (Zeitpunkt 1425.6 a auf den Abbildungen). Mit weißen Konturen sind die Stoßfronten zwischen der einfallenden und der ausströmenden Materie zu erkennen, die sich mit der Zeit von dem Zentrum entfernen. Auf den Aufnahmen für die Zeiten von 1451.6 a und 1481.6 a sind auch die Akkretionsbereiche für die neue, kleine Scheibe zu erkennen, die sich in Zentrumnähe ausbildet. In den späten Simulationsphasen bewegt sich Materie vorwiegend weg von Zentrum (auf den beiden Abbildungen ist die Bewegung in Richtung zum Zentrum mit rot markiert).

2.2.3 Transport–Diffusionsgleichung

Alle Daten werden bei den verwendeten Modellen auf ein zylindrisches Gitter interpoliert. Somit sehen die Transport–Diffusionsgleichungen einfacher aus (siehe 2.2). Die Gleichungen beschreiben den Advektions– und Diffusionstransport zusammen mit den chemischen Umwandlungen der betrachteten Substanzen in der Wolke. Die Gleichungen werden implizit gelöst. Hierbei wird angenommen, dass die Entstehung der CAIs keinen wesentlichen Einfluss auf die Struktur und die Entwicklung der kollabierenden Wolke hat. Die Konzentrationsänderung wird daher als Postprozessor gerechnet. Das entsprechende Modell wird zunächst für jeden Zeitschritt eingelesen, dann werden die Gleichungen für die bekannten Strömungsfelder, Temperaturen und Dichten gelöst.

Die Diffusions-Transportgleichung sieht dann folgendermaßen aus:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{s}\frac{\partial}{\partial s}sv_sn_i + \frac{\partial}{\partial z}v_zn_i = \frac{1}{s}\frac{\partial}{\partial s}snD_i\frac{\partial c_i}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial z}nD_i\frac{\partial c_i}{\partial z} + R_i$$
(2.1)

und

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_s \frac{\partial c_i}{\partial s} + v_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = \frac{1}{ns} \frac{\partial}{\partial s} sn D_i \frac{\partial c_i}{\partial s} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} n D_i \frac{\partial c_i}{\partial z} + \frac{R_i}{n}.$$
(2.2)

Hierbei ist n_i die Teilchendichte und c_i die Konzentration der Spezies *i*. Die Konzentration c_i ist dabei auf die Teilchendichte der Wasserstoffkerne normiert. Die Geschwindigkeit *v* besteht aus einer radialen Komponente v_s und einer vertikalen Komponente v_z . D_i ist der Diffusionskoeffizient, der in der Rechnung gleich der Viskosität gesetzt ist. Die Rate R_i charakterisiert die Produktions– und Zerstörungsmechanismen der Spezies *i*. In diesem Fall beschreibt der Ratenkoeffizient die Verdampfung und Kondensation einzelner Substanzen.

Die in Gleichung (2.2) erwähnte Geschwindigkeit wird nicht nur von den Strömungsfeldern beeinflusst sondern auch durch den Widerstand des umgebenden Gases. Aus diesem Grund werden Partikel mit unterschiedlichen Größen unterschiedlich weit transportiert. Die Reibungskraft des umgebenden Gases hängt vorwiegend von der Größe und der Geschwindigkeit des Teilchens ab. In dieser Arbeit wird die Reibungskraft berücksichtigt, die aufgrund der spiegelnden Reflektion der Gaspartikel an der Oberfläche der Staubpartikel entsteht. Während der Teilchenbewegung in der Gasumgebung erleidet dem Partikel mehrere Stöße mit Gasmolekülen. Dabei findet ein Impulsaustausch statt, was zu Abbremsen der Partikel führt.

Die Teilchendichten bei einem Kollaps sind so verteilt, dass der Radius *a* der kleinen Partikel (bis zu einigen Zentimetern) fast immer deutlich kleiner sind als die mittlere freie Weglänge λ im Gas. Daher wird der Knudsenfall für die Berechnung der Reibungskräfte betrachtet. Die Reibungskraft wird dann durch die Impulsänderung des Staubteilchens bestimmt (siehe u. a. Wilhelm (1970)). Ist die Masse des Teilchens *m*_d und sind **V** und **V**' die Geschwindigkeiten vor und nach dem Stoß, dann ist die Reibungskraft die Differenz zwischen den Impulsen vor und nach dem Stoß

$$\mathbf{F} = m_{\rm d}(\mathbf{V} - \mathbf{V}')\,. \tag{2.3}$$

Die gleiche Gleichung gilt aufgrund der Impulserhaltung auch für Gaspartikel mit den Geschwindigkeiten w und w' und der Masse m_g . Die Änderung des Impulses eines Staubteilchens pro Zeiteinheit ist dann

$$\mathbf{F} = \int_{\text{Oberfläche}} d\sigma \int d^3 w \int d^3 w' \,\Theta(-\mathbf{n}(\mathbf{w} - \mathbf{V})) \cdot n_g |\mathbf{n}(\mathbf{w} - \mathbf{V})| f(\mathbf{w}) \cdot m_g(\mathbf{w} - \mathbf{w}') \cdot f_r(\mathbf{w}'|\mathbf{w}).$$
(2.4)

Hierbei ist σ das Element der Teilchenoberfläche. Mit Hilfe der Oberflächennormalen **n** wird die Komponente der Relativgeschwindigkeit des Gasteilchens senkrecht zur Oberfläche definiert als $\mathbf{n}(\mathbf{w}-\mathbf{V})$). Das Produkt dieser Geschwindigkeit mit der Teilchendichte des Gases n_{g} beschreibt den Teilchenstrom der mit der Oberfläche stoßenden Gasteilchen. Der Ausdruck $m_{g}(\mathbf{w}-\mathbf{w}')$ steht für die Impulsänderung bei der Streuung auf der Oberfläche. Die Wahrscheinlichkeit, dass die Gasteilchengeschwindigkeit den Wert **w**' nach dem Stoß annimmt, wenn die Geschwindigkeit vor dem Stoß den Wert **w** hatte, ist durch $f_{r}(\mathbf{w}'|\mathbf{w})$ ausgedrückt. Die Größe Θ steht für Heavisidesche Funktion:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{wenn } x \ge 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$
(2.5)

Diese Funktion sorgt dafür, dass die Geschwindigkeiten bei der Integration mit einer Maxwellverteilung nur dann berücksichtigt werden, wenn sich das Teilchen auf die Oberfläche zubewegt. Die Integration wird über alle möglichen Gasgeschwindigkeiten, alle möglichen Streugeschwindigkeiten und über die gesamte Teilchenoberfläche durchgeführt. Die Reibungskraft hängt wesentlich von dem Form der Partikel ab. Hier wird angenommen, dass die Partikel kugelförmig sind.

Aus der Energie– und Impulserhaltung und aus der Erhaltung der Tangenzialkomponente der Geschwindigkeit für elastische Stöße folgt die Gleichung für kugelförmigen Partikel:

$$\mathbf{F} = -\pi a^2 \frac{m_{\rm g} m_{\rm d}}{m_{\rm g} + m_{\rm d}} n_{\rm g} v_{\rm th} F(S) \mathbf{V}.$$
(2.6)

Hierbei ist v_{th} die thermische Geschwindigkeit des Gases

$$v_{\rm th} = \sqrt{\frac{2k_{\rm B}T}{m_{\rm g}}} \,. \tag{2.7}$$

Hierin ist k_B die Boltzmann–Konstante und T ist die Temperatur in der Gasumgebung. Die dimensionslose Größe S ist das Verhältniss der Geschwindigkeiten:

$$S = \frac{V}{v_{\rm th}} \,. \tag{2.8}$$

Die Funktion F(S) entsteht bei der Integration des Ausdrucks für die Reibungskraft:

$$F(S) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(1 + \frac{1}{2S^2} \right) e^{-S^2} + \left(S + \frac{1}{S} - \frac{1}{4S^2} \right) \Phi(S), \qquad (2.9)$$

wobei $\Phi(S)$ die Gausssche Fehlerfunktion ist. Der Ausdruck (2.9) stellt im Fall der Unterschallstömung die Eppsteinsche Reibung dar. Formel (2.9) lässt sich allerdings für den ganzen Bereich des Unterschalldrifts bis in den Bereich des Überschalldrifts durch eine einfachere Interpolationsformel approximieren:

$$F(S) = \sqrt{\frac{64}{9\pi} + S^2}.$$
 (2.10)

Die Interpolationsformel (2.10) weicht in dem gesamten Gebiet nur bis auf einige Prozent von dem genauen Wert ab.

Wenn das Gas vorwiegend aus Wasserstoffmolekülen und Helium besteht, dann kann angenommen werden, dass die Ca–und Al– haltigen Partikel deutlich schwerer als die Gaspartikel sind. Dann ändert sich der Ausdruck für die Reibungskraft (2.6) für ein Partikel mit der Geschwindigkeit V_{rel} relativ zur Gasgeschwindigkeit zu

$$\tilde{\mathbf{F}} = -\pi a^2 m_{\rm g} n_{\rm g} v_{\rm th} \sqrt{\frac{64}{9\pi} + S^2} \, \mathbf{V}_{\rm rel} \,.$$
(2.11)

Die Masse des Heliums ist ungefähr doppelt so groß wie die Masse der Wasserstoffmoleküls $m_{\text{He}} = 2m_{\text{H}_2}$. Die Dichtenrelation hängt von der Heliumhäufigkeit ab: $n_{\text{He}} = 2\epsilon_{\text{He}}n_{\text{H}_2}$. Dann gilt, dass $m_{\text{g}}n_{\text{g}} = m_{\text{H}_2}n_{\text{H}_2} + 2m_{\text{H}_2} \cdot 2\epsilon_{\text{He}}n_{\text{H}_2}$. Die Heliumhäufigkeit beträgt ungefähr $\epsilon_{\text{He}} = 0.1$. Dann ist $m_{\text{g}}n_{\text{g}} = 1.4 m_{\text{H}_2}n_{\text{H}_2}$.

Die Reibungskraft (2.6) kann außerdem durch die Bremszeit τ beschrieben werden.

$$\tilde{\mathbf{F}} = -\frac{m_{\rm d}}{\tau} \mathbf{V}_{(rel)} \,. \tag{2.12}$$

Aus den Gleichungen (2.11) und (2.12) folgt

$$\tau = \left(\frac{\pi a^2}{m_{\rm d}} 1.4 \, m_{\rm H_2} n_{\rm H_2} v_{\rm th} \, \sqrt{\frac{64}{9\pi} + S^2}\right)^{-1} \,. \tag{2.13}$$

Die Geschwindigkeit V_{rel} lässt sich durch die Schwerebeschleunigung **g** und die Bremszeit τ ausdrücken:

$$\mathbf{V}_{\text{rel}} = \mathbf{g}\,\boldsymbol{\tau}\,. \tag{2.14}$$

Da die Richtung der Geschwindigkeit V_{rel} durch die Richtung der Schwerebeschleunigung definiert wird, ist die letzte Formel auch in skalarer Form $V_{rel} = g\tau$ gültig. Daraus folgt

$$\frac{1}{\tau} = \frac{g}{v_{\rm th}S} \,. \tag{2.15}$$

Auf diese Weise ist die Bremszeit aus der Gleichung

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\pi a^2}{m_{\rm d}} 1.4 \, m_{\rm H_2} n_{\rm H_2} v_{\rm th} \left(\frac{64}{9\pi} + \left(\frac{g\tau}{v_{\rm th}} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \,. \tag{2.16}$$

zu bestimmen. Zur Vereinfachung wird die Größe $\xi = \frac{\pi a^2}{m_d} 1.4 m_{H_2} n_{H_2} v_{th}$ eingeführt. Dann sieht die Lösung der Gleichung folgendermassen aus:

$$\tau = \sqrt{-\frac{32}{9\pi} \frac{v_{\rm th}^2}{g^2} + \frac{v_{\rm th}}{g} \sqrt{\frac{1024}{81\pi^2} \frac{v_{\rm th}^2}{g^2} + \frac{1}{\xi^2}}}$$
(2.17)

Die Geschwindigkeit der Staubteilchen wird dann mit der Korrektur

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\mathrm{g}} + \mathbf{g}\tau \tag{2.18}$$

begerechnet. Die Geschwindigkeit aus Gl. (2.18) wird in die Transport–Diffusionsgleichung (2.2) eingesetzt. Damit werden die räumlichen Verteilungen der Teilchen mit unterschiedlichen Größen gerechnet.

2.3 Modellbeschreibung

Um ein Modell der Entstehung der CAIs zu konstruieren, ist es zunächst wichtig, zu verstehen, in welcher Form die Ca- und Al-Verbindungen in den Molekülwolken vorhanden sind. Leider können dazu keine genauen Voraussagen gemacht werden. Alles, was bekannt ist, sind die Absorptionslinien der Gase in den interstellaren Wolken. Dabei bleibt zwar die genaue Information über die Zusammensetzung und Struktur der Staubkomponenten unbekannt, allerdings können diese Spektren Hinweise über die Staubkomponenten im ISM liefern. Die Äquivalentbreite der Absorbtionlinien verrät, welche Menge an Molekülen in der Gasphase vorhanden ist. Dabei sind die Häufigkeiten der einzelnen Elementen bekannt, welche den kosmischen Häufigkeiten entspechen. Die Mengen, die in den interstellaren Wolken gemessen werden, werden mit den kosmischen Häufigheiten der Elementen verglichen. Dabei stellt sich heraus, dass manche Elemente im ISM abgereichert sind. Das bedeutet wiederum, dass die Elemente, die in der Gasphase nicht gefunden werden, in der kondensierten Phase vorhanden sind. Aus Messungen dieser Art lassen sich die Daten über Staubkomponenten ableiten. Aus der Arbeit von Jenkins (2004) ist bekannt, dass Kalzium und Aluminium sehr stark abgereichert sind. D. h., diese Elemente sind fast vollständig in fester Form vorhanden. Es ist sehr wahrscheinlich, dass diese und andere stark abgereicherten Elemente zusammen feste amorphe Mischungen bilden. Die Messungen von Jenkins (2004) zeigen auch, dass Silizium ebenfalls deutlich abgereichert ist. Da Silizium ein sehr häufiges Element ist, ist es sehr wahrscheinlich, dass es ein wesentlicher Bestanteil der Staubpartikel im ISM ist. Silizium ist eine sehr wichtige Komponente, denn es kann bei höheren Temperaturen zusammen mit Magnesium und Sauerstoff die thermisch stabilen Silikate bilden. Diese Minerale können die Ca- und Al-enthaltenden Komponenten aufnehmen und damit die Bildung von CAIs verhindern. Die amorphen Staubkörner enthalten zwar ohne Zweifel auch noch andere Komponenten, diese sind aber von nicht so großer Bedeutung für die CAIs-Entstehung.

Somit ist bekannt, dass sich Kalzium und Aluminium im Staub gebunden sind. Sie bilden zusammen mit anderen Elementen, u. a. auch Silizium, amorphe Staubpartikel. Während der Kollapsphase werden die Staubpartikel erwärmt, dabei machen die Teilchen einen chemischen Wandel durch. Zunächst bilden sich die ersten Kristalle, die beim weiteren Erhitzen schnell verdampfen, dann bilden sich die thermisch stabilen Kristallstrukturen, u. a. die stabilen Siliziumverbindungen. Die siliziumhaltigen Minerale entstehen bei hohen Temperaturen (ab ca. 1200 K) und kommen häufig vor. Solange die Minerale nicht verdampft sind, bleiben die Bestandteile der CAIs darin eingeschlossen und von chemischen Veränderungen verschont. Sind die Silikate schließlich verdampft, können die Ca– und Al–Verbindungen gebildet und freigesetzt werden.

Da die Struktur der interstellaren Teilchen nicht genau bekannt ist, kann die Entstehungsra-

te der CAIs nur abgeschätzt werden. Um die charakteristische Zeitskala der CAIs zu bestimmen, wird nur der wichtigste Prozess berücksichtigt – die Verdampfung der thermisch stabilen Minerale. Diese Minerale verhindern die Bildung der CAIs bei hohen Temperaturen solange Ca und Al darin eingeschlossen sind. Erst die Verdampfung der Silikate setzt die Ca- und Al-Verbindungen als eigenständige Staubteilchen frei. Das bedeutet, dass die Verdampfung der Silikatminerale die Entstehungzeitskala der CAIs definiert. Um das Model noch etwas weiter zu vereinfachen, wird angenommen, dass die Partikel rund sind. Dabei bestehen die Teilchen aus einem Ca- und Al-haltigen Kern, der in einem Silikatmantel eingeschlossen ist. In dem Modell wird angenommen, dass der Silikatmantel aus Forsterit besteht. Das Forsterit ist eines der stabilsten Minerale, das auch relativ häufig vorkommt. Seine Verdampfungsmechnismen sind gut untersucht und können leicht modelliert werden. Für den Kern wird angenommen, dass sich seine Verdamfungseigenschaften durch die Eigenschaften von Korund beschreiben lassen. Auch dessen Verdampfungsmechanismen sind gut untersucht und können gut modelliert werden. Es wird daher angenommen, dass die untersuchten Partikel rund sind und aus einem Korundkern und einer Forsterithülle bestehen. Eine schematische Zeichnung des beschriebenen Partikel ist in Abb. 2.12 dargestellt. Im Zentrum des Teilchen befindet sich eine feste Mischung aus CAI-Komponenten. Die Silikatschale besteht aus Fosterit.





Der Ca– und Al–haltige Kern wird zunächst bei der Verdampfung des Silikatmantels freigesetzt und später beim Einmischen in noch wärmere Bereiche dann ebenfalls zerstört. Hier folgt noch eine Annahme. Die Ca– und Al–haltigen Verbindungen, die in warmen Bereichen der Wolke verdampft werden, kondensieren wieder in der ursprünglicher Größe, wenn das Material wieder in kältere Umgebung transportiert wird. Diese Annahme erlaubt es, Rechnungen für unterschiedliche Teilchengrößen getrennt voneinander durchzuführen. In dieser Arbeit wird nicht verfolgt, wie die CAI-Teilchen zerstört werden, wie sie dann wieder kondensieren und koagulieren. Das Ziel dieser Arbeit ist zu demonstrieren, dass die CAIs bei einem schnellen Kollaps produziert und in äußere Bereiche der Wolke effektiv transportiert werden können. Das Material, das aus dem interstellaren Medium kommt, ist zunächst amorph. Dieses amorphe Material ist experimentell nur wenig untersucht. Die Partikel beginnen aber schon bei Temperaturen von ca. 800 K bis 1000 K in der kollabierenden Wolke zu kristallisieren. Dabei werden die Teilchen hinreichend lang den hohen Temperaturen ausgesetzt, um vollständig zu kristallisieren. Daher wird angenommen, dass im Moment der Verdampfung der Partikel (Temperaturen ab ca. 1200 K) nur kristallines Material vorhanden ist. Das erlaubt es uns, für Verdampfungsprozesse die thermodynamischen Daten der gut untersuchten kristallinen Materialien zu benutzen.

Die Laborexperimente zeigen, dass der Verdampfungsmechanismus des Forsteritmantels vom partiellen Druck des Wasserstoffs abhängt. Das Experiment von Nagahara und Ozawa (1996) zeigte, dass Forsterit bei niederigem partiellen Wasserstoffdruck (bis ca. 10^{-6} bar) unbeeinflusst von Wasserstoff verdampft. In diesem Fall werden Mg, SiO und O₂ in die Gasphase freigesetzt:

$$Mg_2SiO_{4(s)} \rightarrow 2Mg + SiO + \frac{3}{2}O_2.^3$$
 (2.19)

Bei einem höheren Partialdruck von Wasserstoff (ab ca. 10^{-6} bar) trägt H₂ zu der Forsteriterverdampfung wesentlich bei. Als Produkte der Reaktion werden Wasserdampf, SiO und Mg in die Gasphase freigesetzt:

$$3H_2 + Mg_2SiO_{4(s)} \rightarrow 2Mg + SiO + 3H_2O. \qquad (2.20)$$

Die beiden Mechanismen der Forsteritverdampfung finden bei einem Kollaps statt (siehe Abb. (2.13) und Abb. (2.14)). Für beide Reaktionsraten wurden die thermodynamischen Daten experimentell bestimmt. Die Verdampfungskonstante α ist bei der Vakuumverdampfung gleich 0.06. Bei höheren Drücken steigert der Wert bis 0.2 (Nagahara und Ozawa 1996).

Der Ratenterm in Gleichung (2.2) charakterisiert die Geschwindigkeit, mit welcher Caund Al-haltige Verbindungen gebildet werden können. Die Bildung der CAIs hängt davon ab, wie schnell die Forsteritschale abgebaut werden kann. Die Produktionsrate wird also durch die Abnahme des Partikelradiuses mit der Zeit definiert. Die äußere Schicht der Teilchen befindet sich im Gleichgewicht mit der Gasumgebung (während des Kollaps bleibt die Wolke optisch dicht im Bereich der Entstehung der CAIs). Wie in Kapitel 1.2 beschrieben, wird die zeitliche Änderung des Partikelradius durch die thermische Geschwindigkeit v_{th} , das Volumen des Grundmoleküls in der kondensierten Phase V_0 , die experimentell bestimmte Ver-

³Hier ist nur molekularer Sauerstoff als Reaktionsprodukt aufgeschrieben. In Wirklichkeit entstehen sowohl molekularer als auch atomarer Sauerstoff. Der letzte macht aber keinen wesentlichen Einfluss auf die weitere Rechnung.



Abbildung 2.13: Der Partialdruck von Wasserstoff bei einem Kollaps zu verschiedenen Zeitpunkten in räumlichen Koordinaten (Kollapsmodel von Tscharnuter u. a. (2009)). Die Farbskala entspricht den Werten des Partialdrucks.



Abbildung 2.14: Der Partialdruck von Wasserstoff bei einem Kollaps zu verschiedenen Zeitpunkten in räumlichen Koordinaten (Kollapsmodel von Schönke und Tscharnuter (2011)). Die Farbskala entspricht den Werten des Partialdrucks.

dampfungskonstante α und die Dichte *n* des durch die Reaktion freigesetzten Gases definiert.

$$\frac{da_{\rm For}}{dt} = -V_0 \,\alpha \, n_{\rm SiO} \, v_{\rm th} \,. \tag{2.21}$$

In diesem Fall wird die Zerstörungsrate des Silikatmantels durch die Teilchendichte des aus dem Forsterit freigesetzten SiO–Gases bestimmt. V_0 wird durch die Atommasse A_m und die Massendichte des Kondensates (in diesem Fall Forsterites) ρ_{For} definiert: $V_0 = A_m / \rho_{\text{For}}$. Das Volumen des Grundmoleküls des Forsterites ist gleich 7.33 · 10⁻²³ cm³.

Die Verdampfung der Forsteritschale definiert die Zeitskala, mit welcher die Ca– und Alhaltigen Verbindungen entstehen können. Durch Ersetzen des Terms *da* in der Formel (2.21) durch die Dicke des Silikatmantels Δa wird die charakteristische Zeitskala τ der Forsteritmantelverdampfung ermittelt.

$$\tau = \frac{\Delta a}{V_0 \,\alpha \, n_{\rm SiO} \, v_{\rm th}} \,. \tag{2.22}$$

Der Ratenterm in der Gleichung (2.2) sieht dann für Forsteritverdampfung folgendermassen aus:

$$\frac{R_{\rm For}}{n} = -\epsilon_{\rm Si} \frac{c_{\rm For}}{\tau}$$
(2.23)

Die Vernichtungsrate des Forsterites ist normiert auf die Häufigkeit des Siliziums ϵ_{Si} .

Im Modell wird angenommen, dass die "fertigen" Ca– und Al–haltigen Verbindungen entstehen, wenn die Schalle Δa komplett abgebaut ist. Damit ist die Zeitskala τ in Gl. 2.22, mit welcher die Schale abgebaut wird, die Zeitskala für die Bildung der CAIs. Um die Kondensation der Ca– und Al–haltigen Komponenten zu bestimmen, muss zunächst die Gleichung (2.2) für die Forsteritverdampfung mit dem Ratenterm aus Gl. (2.23) gelöst werden. Die Dicke der Forsteritschale Δa und das Volumen der Schale werden im Modell vorgegeben. Die thermische Geschwindigkeit ist durch die Temperatur bestimmt: $v_{\text{th}} = \sqrt{k_{\text{B}}T/(2\pi m_{\text{sio}})}$. α ist aus den Laborexperimenten bekannt.

Um die Teilchendichte der SiO–Moleküle zu bekommen, wird angenommen, dass sich der Festkörper mit dem im umgebenen Gas in einem lokalem thermodynamischen Gleichgewicht befindet. Wenn die Dichte der Umgebung groß genug ist, befindet sich das Teilchen im Gleichgewicht mit der umgebenden Gasmischung. Ist der Gasgemischdruck sehr klein, dann erfolgt die Verdampfung so, als ob das Gas nicht anwesend wäre. Es stellt sich ein Gleichgewicht zwischen dem Dampf des Festkörpers und dem Festkörper ein. Die Experimente von Nagahara und Ozawa (1996) zeigen, dass für einen Wasserstoffdruck größer als 10^{-6} bar die Forsteritverdampfung durch die Reaktion von Forsterit mit H₂ bestimmt wird (Chemisputtering), für kleineren H₂–Drücke ist die Wechselwirkung mit H₂ vernachlässigbar. In dem Fall, dass Forsterit mit seinem Dampf im Gleichgewicht ist (siehe Gl. (2.19)) gilt:

$$a_{\rm For} = p_{\rm Mg}^2 p_{\rm SiO} p_{O_2}^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\Delta G_{\rm v}}{R_{\rm gas}T}\right),$$
 (2.24)

wobei a_{For} die Aktivität des Forsterites ist. Da Forsterit ein Festkörper ist, ist seine Aktivität gleich eins. Die auf der rechten Seite verwendete Größen *p* stehen für die partiellen Drücke der entsprechender Gaskomponenten. ΔG_v ist dabei die Gibbssche Enthalpie der Reaktion (2.19).

$$\Delta G_{\rm v} = 2G_{\rm Mg} + G_{\rm SiO} + \frac{3}{2}G_{\rm O_2} - G_{\rm For} \,. \tag{2.25}$$

Die Gibbssche Reaktionsenthalpie wird als Differenz zwischen den Enthalpien von Edukten (in diesem Fall G_{Mg} , G_{SiO} und G_{O_2}) und der Enthalpie der Produkte (Forsterit) mit der entsprechenden stöchiometrischen Koeffizienten aus der Reaktion berechnet.

Aus der Gleichung (2.24) wird der Ausdruck für den partiellen Druck des SiO–Gases ermittelt:

$$p_{\rm SiO} = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm v}}{R_{\rm gas}T}\right)}{p_{\rm Mg}^2 \, p_{\rm O_2}^{\frac{3}{2}}}.$$
(2.26)

In diesem Fall sind Proportionen zwischen einzelnen Elementen durch die Stöchiometrie des Forsterits festgelegt. D.h., Magnesiumatome sind doppelt so häufig wie Siliziumatome, und Sauerstoffatome kommen vier mal häufiger als Si–Atome vor. Entsprechend sehen dann auch die Verhältnisse zwischen den fiktiven Drücken aus:

$$P_{\rm Mg} = 2P_{\rm Si},$$
 (2.27)

$$P_{\rm O} = 4P_{\rm Si}$$
. (2.28)

Die einzelne fiktive Drücke sind durch die Summe der partiellen Drücke der Moleküle, die die entsprechenden Atome beinhalten, definiert. Dabei ist zu beachten, dass in der Forsteritpartikelumgebung nur Mg, SiO und O_2 im Gaszustand vorhanden sind (siehe Formel (2.19))

$$P_{\rm Si} = p_{\rm SiO}, \qquad (2.29)$$

$$P_{\rm Mg} = p_{\rm Mg}, \qquad (2.30)$$

$$P_{\rm O} = p_{\rm SiO} + \frac{3}{2}p_{\rm O_2}. \qquad (2.31)$$

Da Aktivität des festen Fosterits gleich eins ist (siehe Gl. (2.24)), ist der partielle Druck des SiO–Gases bei Vakuumverdampfung durch den Ausdruck

$$p_{\rm SiO} = 2^{-\frac{7}{9}} \exp\left(-\frac{2}{9} \frac{\Delta G_{\rm v}}{R_{\rm gas}T}\right)$$
(2.32)

bestimmt.

Im Fall der Forsteritverdamfung durch Reaktion mit Wasserstoff befinden sich die Teilchen in einem dichteren Medium. Damit wird ein Gleichgewichtszustand mit dem umgebenden Gas entstehen und nicht mit dem eigenen Dampf. Der Druck des SiO–Gases ist in diesem Fall aus der Reaktion (2.20) zu bestimmen:

$$a_{\rm For} p_{\rm H_2}{}^3 = p_{\rm Mg}{}^2 p_{\rm SiO} p_{\rm H_2O}{}^3 \exp\left(\frac{\Delta G_{\rm for}}{R_{\rm gas}T}\right).$$
 (2.33)

Die Enthalpie der Reaktion ist in diesem Fall $\Delta G_{\text{for}} = 2G_{\text{Mg}} + G_{\text{SiO}} + 3G_{\text{H}_2\text{O}} - G_{\text{For}} - 3G_{\text{H}_2}$. Daraus folgt, dass der partielle Druck des SiO–Gases von den partiellen Drücken p_{Mg} , $p_{\text{H}_2\text{O}}$ und p_{H_2} in der umgebenden Gasmischung abhängig ist. Diese Drücke lassen sich im thermodynamischen Gleichgewicht ausrechnen.

Von magnesiumenthaltenden Gasen ist praktisch nur reines Mg–Gas vorhanden. Daraus folgt, dass der Magnesiumpartialdruck ausschließlich von der Häufigkeit des Mg bestimmt wird

$$p_{\rm Mg} = \epsilon_{\rm Mg} P_{\rm H} \,, \tag{2.34}$$

wobei $P_{\rm H}$ der fiktive Druck der Wasserstoffkerne ist. Um diesen zu berechnen, berücksichtigen wir nur die wichtigsten und die häufigsten Komponenten, d. h. Wasserstoff und Helium. Der Gesamtdruck in der Wolke ist $P_{\rm ges} = p_{\rm H_2} + p_{\rm He}$. Wenn $p_{\rm H_2}$ das häufigste wasserstoffhaltige Gas ist, dann gilt $P_{\rm H} = 2p_{\rm H_2}$. Die Häufigkeit des He-Gases bestimmt seinen partiellen Druck: $p_{\rm He} = \epsilon_{\rm He}P_{\rm H}$. Die Formel für den fiktiven Druck lautet dann:

$$P_{\rm H} = \frac{2P_{\rm ges}}{1 + 2\epsilon_{\rm He}}.$$
(2.35)

Der Wasserdampf trägt zusammen mit Kohlenstoffmonoxyd zum fiktiven Druck $P_{\rm O}$ der Sauerstoffkerne bei. Die andere sauerstoffenthaltenden Gaskomponenten (vorwiegend Verbindungen mit Silizium) sind nicht so häufig wie die oben genanten Moleküle CO und H₂O und können daher vernachlässigt werden. Der fiktive Druck $P_{\rm O} = \epsilon_{\rm O}P_{\rm H}$ ist durch die Summe von $p_{\rm H_2O}$ und $p_{\rm CO}$ definiert. Dabei ist das Gas CO wohl die häufigste kohlenstoffenthaltende Komponente in der Gasmischung, d. h. der partielle Druck des CO–Gases ist durch die Kohlenstoffhäufigkeit definiert: $p_{\rm CO} = \epsilon_{\rm C}P_{\rm H}$. Der Ausdruck für den partiellen Druck des Wasserdampfes lautet in diesem Fall

$$p_{\rm H_2O} = (\epsilon_{\rm O} - \epsilon_{\rm C}) P_{\rm H}. \qquad (2.36)$$

Aus der Gleichung (2.33) folgt:

$$p_{\rm SiO} = \frac{1}{8 \epsilon_{\rm Mg}^2 (\epsilon_{\rm O} - \epsilon_{\rm C})^3} \left(\frac{0.5 + \epsilon_{\rm He}}{P_{\rm ges}} \right)^2 \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm for}}{R_{\rm gas}T}\right).$$
(2.37)

Wenn der Partialdruck des SiO–Gases bekannt ist, kann die Teilchendichte des Gases $n_{SiO} = p_{SiO}/k_BT$ in der Gleichung (2.23) berechnet werden. Damit ist die charakteristische Zeitskala der Forsteritmantelverdampfung bekannt. Diese Zeitskala bestimmt die Zeit, die der Silikatmantel braucht, um vollständig verdampft zu werden. Dabei wird der Ca–Al–haltige Kern befreit. Auf diese Weise charakterisiert die Vernichtungsrate von Forsterit die

Entstehungsrate der Ca–Al–Teilchen. Da die Silikate häufiger als Ca und Al vorkommen, muss die entsprechene Zeitskala auf die Häufigkeit der Ca– und Al–enthaltenden Verbindungen normiert werden. Dann lautet die Entstehungsrate für Ca–Al–Einschlüsse

$$R_{\text{CaAl}} = \frac{\epsilon_{\text{Al}}}{\epsilon_{\text{Si}}} \frac{1}{\tau_{\text{for}}} c_{\text{For}} \,. \tag{2.38}$$

Die Formel (2.38) wird als Ratenterm in die Gl. (2.2) als Produktionsrate der CAIs eingesetzt. Die Aufgabe vereinfacht sich dadurch, dass das Gleichungssystem für Forsterit unabhängig von dem Gleichungssystem für die Entstehung der CAIs gelöst werden kann.

2.4 Ergebnisse und Diskussion

Bevor der Kollaps stattgefunden hat, war das Staubmaterial in einem amorphen Zustand in der Wolke mit kosmischen Elementhäufigkeiten vorhanden. Daher ist die Anfangskonzentration der CAIs auf null gesetzt, denn diese Staubsorte hat am Anfang der Rechnung gar nicht existiert. Am Rande der Wolke ist die Konzentration der CAIs entsprechend auch auf null gesetzt, denn die Ca- und Al-Minerale können in den äußeren, kalten Zonen der Wolke nicht produziert werden. Das Forsterit ist zwar vor dem Kollaps nicht in kristalliner Form vorhanden, kommt aber als amorphes Forsterit im Modell mit Siliziumhäufigkeit vor, solange es in den wärmeren Bereichen noch nicht zerstört ist. Diese Anfangsverteilung lässt uns auf die Entstehung der CAIs konzentrieren. Für die Entstehung der Ca- und Al-Verbindungen ist es nicht wichtig, genau zu wissen, wo genau Forsterit gebildet wird. Wichtig ist nur, dass das Forsterit im Moment seiner Verdampfung in kristallinem Zustand vorkommt, und das ist bei einem Kollaps der Fall. Bei der Annäherung an das warme Zentrum der Wolke werden die Staubpartikel nämlich zunächst auf die Temperaturen erwärmt, bei welchen Forsterit kristallisiert (bei 800-900 K). Bei weiterem Erwärmen verdampft Forsterit (ca. 1 300 K), dabei verbleiben die refraktären Elemente (vor allem Ca und Al). Daher ist angenommen, dass die Ca- und Al-haltigen Partikel direkt in einem Forsteritmantel aus der ISM kommen und bei der Verdampfung freigesetzt werden. Die Anfangskonzentration von Forterit wird gleich der Elementhäufigkeit des Siliziums gesetzt. Die gleiche Konzentration hat Forsterit auch an der Grenzen der Wolke als Randbedingung.

Der Radius des Ca– und Al–haltigen Kerns *a* wird vorgegeben. Es ist angenommen, dass Ca– und Al–haltige Minerale nach dem Verdampfen als Partikel mit dem Anfangsradius *a* wieder kondensieren. Die Größe der Forsteritschale wird aus der Geometrie der Teilchen und Materialeigenschaften abgeschätzt. Wenn die kosmische Häufigkeit von Silizium $\epsilon_{Si} =$ $3.58 \cdot 10^{-5}$ und die Häufigkeit von Aluminium $\epsilon_{Al} = 3.04 \cdot 10^{-6}$ ist, ist das Volumenverhältnis der Forsteritschale zum Korundkern

$$\frac{V_{\text{For}}}{V_{\text{Kor}}} = \frac{\epsilon_{\text{Si}}}{\epsilon_{\text{Al}}} \frac{\rho_{\text{Kor}}}{\rho_{\text{For}}}.$$
(2.39)

Die hier verwendete Korunddichte ist $\rho_{\text{Kor}} = 4\text{g/cm}^3$. Das Forsterit hat die Dichte $\rho_{\text{For}} = 3,275\text{g/cm}^3$. Aus dem Ausdruck (2.39) folgt, dass die Dicke der Forsteritschale 1.487*a* beträgt, wobei *a* der Radius des Korundkerns ist.

Die Konzentration der CAIs wurde für ausgewählte Teilchengrößen sowohl für das implizite als auch für das explizite Kollapsmodell berechnet. Die Ergebnisse spiegeln die Dichteund Temperaturverteilungen in den dazugehörigen Modellen wider. Die Strömungen in den kollabierenden Wolken haben einen wesentlichen Einfluss auf die endgültige Mineralverteilung in der Wolke.

Dieser Abschnitt besteht aus zwei Teilen. In dem ersten werden die Ergebnisse der Rechnung mit dem implizitem Kollapsmodell gezeigt. In dem zweiten sind die Ergebnisse der Rechnung mit dem expliziten Kollapsmodell dargestellt.

2.4.1 Implizites Kollapsmodell

In den Abbildungen 2.15-2.17 sind die Ergebnisse der Rechnungen mit dem impliziten Kollapsmodell dargestellt. Die Konzentration der Ca– und Al–reichen Minerale verändert sich mit der Zeit entsprechend dem Temperaturprofil und der Dichteverteilung. Das bei höhen Temperaturen chemisch veränderte Material wird durch turbulente Diffusionsprozesse und mit den Advektionsströmungen in die äußere Bereiche des ersten Kerns der kollabierenden Wolke transportiert.

In Abb. 2.15 ist die zeitliche Veränderung der Konzentration der Ca- und Al-haltigen Minerale mit einer Partikelgröße von 10⁻² cm dargestellt. Wenn der Forsteritmantel beginnt zu verdampfen, startet auch der Entstehungsprozess der Ca- und Al-haltigen Minerale. Abb. 2.16 zeigt die Verteilung des Forsterits (Hülle des Ca- und Al-haltigen Kernns). Am Rand ist die Konzentration gleich der Siliziumhäufigkeit gesetzt. Im Zentrum der Scheibe entsteht mit der Zeit ein Loch. Das Loch spiegelt die Konturen des Gebiets wider, in welchem die Temperatur die Grenze von etwa 1 300 K überschreitet. In diesem Gebiet findet die effektive Forsteritverdampfung statt. Hier ist zu berücksichtigen, dass das Forsterit in diesem Modell nicht wiederkondensiert, was aber keine Auswirkung auf die Produktion der Ca- und Al-haltigen Minerale hat, weil die Ca- und Al-haltigen Minerale nur aus den noch unveränderten ISM-Teichen entstehen. Das forsteritfreie Gebiet könnte aber etwas kleiner werden, wenn die Rekondensation mitberücksichtigt würde. An den Konturen des forsteritfreien Gebiets sind merkliche Spuren der Transportprozesse in der kollabierenden Wolke zu erkennen. Die Transportprozesse lassen das forsteritfreie Gebiet nicht über 1AU vom Zentrum wachsen. Ein weiteres Indiz, welches auf die Mischungsprozesse hinweist, ist die verschmierte Grenze der forsteritfreien Zone. In diesem Modell sind die Stömungsfelder so gerichtet, dass das unveränderte Material immer auf das heiße Gebiet zuströmt. Die kon-



Abbildung 2.15: Die Konzentration der CAIs bei einem Kollaps (implizites Modell) zu verschiedenen Zeitpunkten. Die Abbildung oben zeigt die Konzentration de Ca–Al– Verbindungen normiert auf Wasserstoffkerne. In der untere Abbildung ist die Konzentration der Ca– und Al–haltigen Minerale normiert auf die Aluminiumelementhäufigkeit dargestellt. Der Radius des Ca– und Al–haltigen Kerns ist in dieser Rechnung auf $a = 10^{-2}$ cm gesetzt.



Abbildung 2.16: *Die Konzentration des Forsterits bei einem Kollaps (implizites Modell) zu verschiedenen Zeitpunkten.*



Abbildung 2.17: Die Konzentrationskonturen der Ca– und Al–haltigen Minerale mit Teilchenradien von 10^{-5} cm, 10^{-4} cm, 10^{-3} cm, 10^{-2} cm, 0.1 cm und 1 cm zum Zeitpunkt 2 820 a nach dem ersten Kollaps (implizites Modell).

tinuierliche Zufuhr der Materie in den zentralen Bereich sorgt für eine effektive Produktion der Ca–Al–Verbindungen. Diese werden dann durch Turbulenz nach außen transportiert.

Die Konzentration der Ca– und Al–Verbindungen steigt mit der Zeit und Temperatur. Die frisch gebildeten CAIs werden durch Transportprozesse in andere Bereiche der Wolke gebracht. Da die Rekondensationsprozesse im Modell nicht berücksichtigt sind, ist die Konzentration der Ca– und Al-haltigen Minerale im Zentrum der Wolke immer größer als null. Im zentralen Gebiet, in dem Temperaturen von über 1 300 K herrschen, werden die Ca– und Al–Verbindungen verdampft. Die Konzentration der Ca–Al–Verbindungen kann daher im Bereich bis 1 AU vom Zentrum zu den Zeitpunkten 2 370 a und 2 820 a nach dem ersten Kollaps etwas kleiner sein als es in den Abbildungen dargestellt ist, was aber aufgrund der Rekondensation keinen Einfluss auf die Konzentration in weiter entfernten Bereichen hat. In dieser Arbeit wird der Schwerpunkt auf die Untersuchung der Verbreitung der Ca– und Al–haltigen Minerale gelegt, daher ist die Konzentration der Ca–Al–Verbindungen im Zentrum der Wolke in diesem Fall irrelevant.

Die Konzentrationsprofile ähneln der Dichteverteilung (siehe Abb. 2.2), sehen aber in der Höhe in Richtung der Rotationsachse etwas ausgedehnter aus. Das liegt daran, dass das Temperaturmaximum leicht oberhalb der Mittelebene liegt, was die Zerstörung des Forsterits und dementsprechend die Bildung der Ca–Al–Verbindungen in dieser Region begünstigt (siehe Abb. 2.3). Daher haben die Ca–Al–Verbindungen ihre maximale Konzentration im Bereich, in dem Forsterit eine niedrige Konzentration hat.

In Abb. 2.15 unten ist das Verhältniss der CAIs–Konzentration zur kosmischen Aluminiumhäufigkeit dargestellt. Das Verhältnis zeigt, welcher Anteil des gesamten Aluminiums in CAIs gebunden ist. Die rasanten Strömungen in der Wolke während der Kollapsphase sorgen dafür, dass Ca– und Al–haltige Minerale in weniger als tausend Jahren in weit entferne Bereiche vom Zentrum transportiert werden. Zum Zeitpunkt 2 820 a nach dem ersten Kollaps erreichen die Werte des in CAIs gebundenen Aluminiums im Bereich bis fast 4 AU vom Zentrum in radialer Richtung und bis 3 AU in vertikaler Richtung einen Wert von 1 Prozent. Der Bereich 2-5 AU ist von besonderem Interesse, weil die Meteoritenmutterkörper aus dieser Region stammen. Aus diesem Grund wird dieser Abschnitt der Wolke etwas genauer untersucht.

In Abb. 2.17 sind die Konzentrationskonturen der CAIs in räumlichen Koordinaten für verschiedenen Teilchengrößen am Ende des impliziten Kollapsmodells (2 820 a nach dem ersten Kollaps) zu sehen. Die Rechnungen wurden für die Teilchenradien 10^{-5} cm, 10^{-4} cm, 10^{-3} cm, 10^{-2} cm, 0.1 cm und 1 cm durchgeführt. Die Konturen zeigen, wie weit und mit welcher Konzentration die Partikel einer bestimmten Größe transportiert wurden. Wie zu erwarten, werden die kleinen Partikel deutlich weiter als die größeren transportiert. Dabei ist zu erkennen, dass die Konturen der maximalen Konzentration der großen Teilchen die Konturen des forsteritfreien Gebiets wiederholen. Die kleinen Partikel verbreiten sich dagegen in entferntere Zonen. Die maximale Konzentration der 10^{-5} cm großen Partikel reicht bis in Bereiche, die im Vergleich zur maximalen Konzentration der 1 cm großen Teilchen bis zu 0.5 AU weiter vom Zentrum entfernt sind. Das ist das Ergebnis der Wechselwirkung der Staubpartikel mit dem umgebenden Gas. Größere Partikel erfahren aufgrund des größeren Querschnitts mehr Widerstand als kleine Teilchen. Mit anwachsendem Abstand zum Zentrum werden die Unterschiede bei den Konzentrationen in radialer Richtung noch deutlicher. Kleine Partikel bewegen sich fast wie Gasmoleküle innerhalb der Wolke, die Konzentrationskonturen der kleinen Partikel haben dementsprechend die Form einer Scheibe. Die großen Partikel dagegen bleiben näher im Zentralbereich konzentriert, das Konzentrationsprofil hat damit eine nicht so stark ausgeprägte Scheibenstruktur wie das der kleinen Partikel.



Abbildung 2.18: Die Konzentrationen der Ca– und Al–haltigen Minerale mit Teilchenradien von 10^{-5} cm, 10^{-4} cm, 10^{-3} cm, 10^{-2} cm, 0.1 cm und 1 cm bei einem Kollaps (implizites Modell) in der Mittelebene zum Zeitpunkt 2 820 a nach dem ersten Kollaps.

Um die Größenverteilung der Teilchen anschaulicher zu machen, werden die Konzentrationen der Teilchen in der Mittelebene zum Zeitpunkt 2 820 a nach dem ersten Kollaps abgebildet (siehe Abb. 2.18). In der Abbildung ist die auf die Aluminiumelementhäufigkeit normierte Konzentration der Ca– und Al–haltigen Minerale als Funktion des radialen Abstandes aufgetragen. Jede Linie entspricht der Konzentration einer Partikelgröße in der Mittelebene der
Scheibe. Wie in Abb. 2.17 zu erkennen ist, werden kleinere Partikel effektiver als größere in äußere Bereiche der Scheibe transportiert. Mit steigendem Abstand zum Zentrum werden Konzentrationsunterschiede größer. Dies ist eine Folge der unterschiedlichen Driftgeschwindigkeiten der Partikel mit unterschiedlichen Größen. Die Partikel scheinen mit einem Potenzgesetz verteilt zu sein. Das ist aber auf keinen Fall die Größenverteilung, die bei Beobachtung (z. B. in Meteoriten) gemessen werden kann. Die implizite Modellrechnung endet kurz vor dem zweiten Kollaps. Das bedeutet, dass die Partikel auch später noch innerhalb der Wolke umverteilt werden. Wichtig ist, dass ein wesentlicher Anteil an Ca– und Al–haltigen Mineralen schon in dieser Kollapsphase gebildet wird. Im Abstand 2 AU vom Zentrum sind ca. 20-40% vom gesamten Aluminium in Ca–Al–Verbindungen gebunden, und im Abstand 5 AU sind das ca. 0.8-4%.

2.4.2 Explizites Kollapsmodell

In den Abbildungen 2.5 und 2.6 sind die Dichte- und Temperaturprofile zu verschiedenen Zeitpunkten vor dem 2. Kollaps dargestellt. Während dieser Entwicklungsphase bleibt die Temperatur zunächst zu niedrig für die Entstehung der Ca- und Al-haltigen Minerale. Erst ab ca. 980 a nach dem 1. Kollaps werden die Bedingungen für die Bildung der Ca- und Al-haltigen Minerale günstiger. Der Forsteritmantel beginnt zu diesem Zeitpunkt langsam zu verdampfen, was die Entstehung der Ca- und Al-haltigen Minerale ermöglicht. Ab ca. 1000 a nach dem ersten Kollaps werden die Ca-Al-Verbindungen effektiv produziert. In den Abb. 2.19 und 2.20 sind die Konzentrationen des Forsterits und der Ca- und Al-Minerale kurz vor dem zweitem Kollaps dargestellt. Die Konzentrationsprofile ähneln denen, die am Ende der impliziten Rechnung entstehen (siehe Abb. 2.15 und Abb. 2.16 zu den Zeiten $2.37 \cdot 10^3$ a und $2.8 \cdot 10^3$ a). Im Zentrum entsteht ein forsteritfreies Gebiet. Die Größe des Gebiets ist etwas kleiner als am Ende der Rechnung mit dem impliziten Kollapsmodell. Das liegt an den unterschiedlichen Temperaturprofilen in den Modellen. Die Konzentrationen der Caund Al-haltigen Minerale haben ähnliche Werte bis zum Abstand von etwa 8 AU in radialer Richtung. Die Konturen der Konzentrationen von 10⁻⁵ und niedriger sind im expliziten Modell in weiter entfernte Bereiche der Wolke ausgedehnt als im impliziten Modell. Die Unterschiede in den Konzentrationsverteilungen spiegeln die Unterschiede in den Massendichteverteilungen wider (vergl. Abb 2.7 zum Zeipunkt 1820 a und Abb 2.2 zum Zeitpunkt 1380 a). Die Rechnungen ergeben, dass bei beiden Modellen ungefähr die gleiche Menge an Ca- und Al-haltigen Mineralen (kurz vor dem zweiten Kollaps) produziert wird.

Die Abbildungen 2.21-2.23 zeigen die weitere Entwicklung der Silikate und der Ca– und Al–haltigen Minerale während des protostelaren Kollapses. Die Abbildungen präsentieren Ergebnisse der Rechnungen zu den Zeitpunkten 1380 a 1425.6 a, 1451.6 a und 1481.6 a. Der



Abbildung 2.19: *Die Konzentration des Forsterits bei einem Kollaps (explizites Modell) zum Zeitpunkt 1380 a nach dem ersten Kollaps.*



Abbildung 2.20: Die Konzentration der Ca–Al–Minerale normiert auf Aluminiumelementhäufigkeit bei einem Kollaps (explizites Modell) zum Zeitpunkt 1380 a nach dem ersten Kollaps.



Abbildung 2.21: *Die Konzentration des Forsterits bei einem Kollaps (explizites Modell) zu verschiedenen Zeitpunkten kurz vor (links oben) und nach dem zweiten Kollaps.*



Abbildung 2.22: Die Konzentration der Ca– und Al–haltigen Verbindungen bei einem Kollaps (explizites Modell) zu verschiedenen Zeitpunkten kurz vor (links oben) und nach dem zweiten Kollaps.



Abbildung 2.23: Wie in Abb. (2.22), hier aber normiert auf die Aluminiumelementhäufigkeit.

erste Zeitpunkt zeigt die Entwicklung der Wolke kurz vor dem zweiten Kollaps, die nächsten 3 Aufnahmen zeigen die Entwicklung direkt nach dem zweiten Kollaps.

Abb. 2.21 zeigt die Konzentrationsprofile des Forsterites zu ausgewählten Zeitpunkten in räumlichen Koordinaten. Vor dem zweiten Kollaps waren die Konzentrationsprofile des Forsterits sehr ähnlich mit den Tempraturprofilen. Nach dem zweiten Kollaps ist der Einfluss der Strömungen in der kollabierenden Wolke deutlicher zu sehen. Das forsteritfreie Material wird rasant in entfernte Bereiche der Wolke transportiert. Das forsteritfreie Gebiet dehnt sich durch die Strömungen bis 20 AU in radialer Richtung und bis zu 70 AU in vertikaler Richtung zum Zeitpunkt 1481.6 a nach dem ersten Kollaps aus. Die beobachtete Verbreitung des forsteritfreien Gebiets ist die Folge der fehlenden Kondensationsprozesse. Wenn Forsterit im Modell wieder kondesieren würde, würden die Konturen des forsteritfreien Bereichs die Konturen der Temperatur, wie es vor dem zweiten Kollaps war, wiederholen. In Abb. 2.9 ist zu sehen, dass die für die Forsteritverdampfung notwendige Temperatur nur in der Nähe des Zentrums erreicht wird. Zum Zeitpunkt 1425 a nach dem ersten Kollaps verbreitet sich das Gebiet, in dem Forsterit verdampft werden kann, bis etwa 3 AU in radialer Richtung und bis etwa 5.5 AU in vertikaler Richtung. Auf diese Weise ist die Forsteritkonzentration nach dem zweiten Kollaps eine Charakteristik der Mischungs- und Strömungsverhältnisse in der kollabierenden Wolke. Aufgrund des Materieflusses aus dem Zentralgebiet wird chemisch verändertes Material ähnlich verteilt wie die Massendichte in der Wolke (siehe Abb. 2.7), d.h. vorwiegend in Richtung 30°-90° zu Rotationsachse. Aus den Konzentrationsprofilen des Fosterits ist die bevorzugte Verbreitungsrichtung der neu gebildeten Ca- und Al-haltigen Minerale zu sehen, weil sie zur Zeit der Forsteritverdampfung im zentralen Bereich entstehen.

Abbildung 2.22 zeigt die Konzentrationen der Ca– und Al–haltigen Minerale zu ausgewählten Zeitpunkten in räumlichen Koordinaten. Abb. 2.23 zeigt die Konzentration der Ca– und Al–haltigen Minerale normiert auf die Aluminiumelementhäufigkeit. Die Geometrie der Konzentrationsprofile hat große Ähnlichkeit mit den Dichteprofilen zu den entsprechenden Zeitpunkten. Nach dem zweiten Kollaps werden die Ca– und Al–haltigen Verbindungen rasch in weit von dem Zentralgebiet entfernte Bereiche bis 50 AU in radialer Richtung und bis 80 AU in vertikaler Richtung transportiert. Hier ist zu beachten, dass die Konzentration der Minerale auf die Anzahl der Wasserstoffkerne normiert ist. In diesem weit ausgedehnten Gebiet bis 80 AU in vertikaler Richtung ist die Konzentration der Ca– und Al–haltigen Verbindungen zwar hoch, die Gesamtdichte ist aber entlang der Rotationsachse ziemlich niedrig. Das bedeutet, dass die absolute Massendichte der Ca–Al–Verbindungen in diesem Bereich auch niedrig ist. Wenn der zweite Kollaps beginnt (Zeitpunkt 1425.6 a), steigt die Temperatur in einem ausgedehnten Bereich bis ca. 6 AU in vertikaler Richtung und ca. 3 AU in radialer Richtung (siehe Abb. 2.9), was die Produktion der Ca– und Al–haltigen Minerale zunächst beschleunigt. Dann beginnt der innere Bereich zu expandieren. Als Folge werden die frisch gebildeten Minerale

zusammen mit der anderen Materie in Entfernungen bis 20 AU transportiert. Dabei ist der Anteil des in Ca-Al-Verbindungen gebundenen Aluminiums im Bereich 10 AU in radialer Richtung und 20 AU in vertikaler Richtung sehr hoch (siehe Abb. 2.23). In diesem Bereich ist praktisch das ganze Aluminium in Form von Ca- und Al-haltigen Mineralen vorhanden. Dieses Gebiet repräsentiert die innere Scheibenzone, die aufgrund der starken Strömungen in Abstände bis 10 AU in radialer Richtung und 20 AU in vertikaler Richtung ausgedehnt wurde. Der restliche Teil der Scheibe ab 10 AU in radialer Richtung bleibt zunächst erhalten und wird durch den aufgeblasenen inneren Bereich nur etwas verschoben. In diesem Bereich bleibt die Konzentration der Ca- und Al-haltigen Minerale zunächst gleich der Konzentration kurz vor dem zweiten Kollaps (vergl. Aufnahmen zum Zeitpunkt 1380 a und 1425.6 a). Bei weiterer Ausdehnung des inneren Kerns bleiben die Konzentrationen der Ca- und Alhaltigen Minerale hoch. Der innere Bereich der Scheibe verbreitet sich bis 80 AU in vertikaler Richtung und bis 50 AU in radialer Richtung zum Zeitpunkt 1481.6 a. Dabei vermischt sich das Material mit den Überresten der Scheibe. Als Folge dieser Mischungsprozesse ist die Konzentration der Ca-und Al-haltigen Komponenten im Abstand ab 30 AU niedriger als im zentralen Gebiet.

2.4.3 Diskussion und Ausblick

In dieser Arbeit wird ein Entstehungsszenarium der kalzium– und aluminiumreichen Einschlüsse präsentiert. Die Ergebnisse der durchgeführten Modellrechnungen sprechen dafür, dass diese Minerale während der letzen Phasen des Kollaps einer Molekühlwolke gebildet werden. Die Bedingungen im zentralen Bereich der kollabierenden Wolke begüstigen die Bildung der Ca– und Al–haltigen Minerale durch Abscheidung während der Verdampfung von Silikate und durch Kondensation aus der Gasphase. Dabei wird das frisch gebildete Material in Abstände von einigen Zehn AU von dem Zentrum transportiert.

Die in der Arbeit durchgeführten Modellrechnungen beziehen sich auf die sehr frühe Phase der Planetenentstehung. Die Simulationen wurden mit zwei Kollapsmodellen gerechnet: mit einem impliziten Modell von Tscharnuter u. a. (2009) und einem expliziten Modell von Schönke (2010); Schönke und Tscharnuter (2011). Die Ergebnisse der beiden Modelle zeigen sehr ähnliche Entstehungsszenarien der Ca– und Al–haltigen MInerale kurz vor dem zweitem Kollaps. Schon in dieser Entwicklungsphase der kollabierenden Wolke wurden Ca– und Al–reiche Minerale effektiv produziert. Die Strömungen in der Wolke sorgen im weiteren Verlauf des Kollaps dafür, dass die frisch gebildeten Ca–Al–Verbindungen in Abstände von bis zu über 10 AU von dem zentralen heißen Entstehungsgebiet verbreitet werden. Das explizite Kollapsmodell liefert darüber hinaus auch Daten für die Wolke kurz nach dem zweiten Kollaps. In dieser Entwicklungsphase der kollabierenden Wolke verbreiten sich die Ca– und Al-haltigen Verbindungen in noch weiter vom Zentrum entfernte Gebiete bis 80 AU entlang der Rotationsachse und bis 50 AU in der Mittelebene.

In der Arbeit wurde gezeigt, dass die Ca– und Al–haltigen Minerale effektiv in einer kollabierenden Wolke produziert werden können. Hier werden diese Verbindungen nur als eine Staubsorte betrachtet. Dabei werden die Minerale im zentralen Gebiet der Wolke verdampft und beim Einmischen in die kühleren Bereich der Wolke wieder kondensiert. Auf die Gesamtkonzentration der Ca–und Al–haltigen Minerale machen die Rekondensationsprozesse keinen wesentlichen Einfluss. Die Kondensationsprozesse und das Schmelzen der Minerale spielen jedoch eine wesentliche Rolle dafür, welche Verbindungen genau gebildet werden können. Die Arbeit von Blander und Fuchs (1975) zeigte, dass einige Minerale aus der flüssigen Phase gebildet worden sind. Während eines Kollapses werden Temperaturen weit über 1000 K erreicht. Somit sind die Bedingungen für die Bildung der Ca– und Al–haltigen Verbindungen durch die Kondensation aus der Gasphase als auch durch das erneute Erhitzen der existierenden Partikel bei einem Kollaps erfüllt. Die Strömungen in einer kollabierenden Wolke bringen die Ca– und Al–haltigen Partikel immer wieder in das heiße zentrale Gebiet, wo sie chemisch verändert werden können.

Die in der Arbeit dargestellten Ergebnisse stimmen gut mit Beobachtungen überein (Amelin u. a. 2002; Jacobsen u. a. 2008; Blander und Fuchs 1975; MacPherson u. a. 2005): Die während eines Kollapses gebilteten Ca– und Al–haltigen Minerale wurden in der frühen Phase der Planetenentstehung gebildet. Sie sind das älteste bekannte Material im Sonnensystem. Sie wurden innerhalb $\leq 10^4$ a gebildet und verbreiteten sich innerhalb von wenigen Tausend Jahren in Abstände von einigen Zehn AU und werden dabei durch Mischungsprozesse mehrfach aufgeheizt und abgekühlt. Kapitel 2 Kalzium- und aluminiumreiche Einschlüsse

Kapitel 3

Zerstörung präsolarer SiC–Teilchen in protoplanetaren Scheiben

3.1 Einleitung

Studien von primitiven Meteoriten liefern wichtige Informationen über die ursprüngliche chemische Zusammensetzung unseres Sonnensystems, über interstellare Staubteilchen und über die Sternentstehung. Dabei sind präsolare Silizumkarbidteilchen (SiC) von besonderem Interesse. Sie gehören zu den am meisten verbreiteten präsolaren Staubteilchen in den primitiven Meteoriten (siehe Hoppe 2004). Da diese Verbindung eine sehr hohe Kondensationstemperatur hat, kann sie in Bereiche dicht an den Stern heran eindringen. Dabei bleiben Molekülverbindungen aus der Gasphase der Sternumgebung im SiC–Gitter eingeschlossen. Auf diese Weise behalten die präsolaren SiC–Partikel in ihrem Gitter die Information über die von den früheren Sternen synthetisierten Isotope.

Siliziumkarbid liefert Informationen über die Sternentwicklung und die Nukleosynthese. Die SiC–Partikel enthalten Edelgase, welche während der Teilchenentstehung im Inneren der Partikel eingeschlossen wurden. So weisen Xe-S und Ne-E(H) Isotope auf s–Prozesse hin (siehe Hoppe u. a. 1994), die in AGB–Sternen stattfinden. Einschlüsse aus N, Al, Ti, Ca, Fe, Sr, Zr, Mo–Verbindungen sowie Spurenelemente wurden in SiC–Partikeln ebenfalls aufgefunden und untersucht. Präsolare SiC–Partikel sind gut untersucht und liefern ein breites Informationsspektrum über die Herkunft und die Entwicklung präsolarer Staubteilchen.

Siliziumkarbidpartikel sind in Meteoriten in erstaunlich großen Mengen vorhanden. Es gibt sogar viel mehr präsolare SiC–Partikel als präsolare Kohlenstoffteilchen. Diese Tatsache ist besonders insteressant, denn die Kohlenstoffpartikel werden bei der Sternentwicklung viel häufiger produziert als die SiC–Teilchen (siehe Abb. 3.1). Wie in Abb. 3.1 zu sehen ist, wird allein bei AGB–Sternen mehr als zehnmal häufiger Kohlenstoffstaub als SiC produziert. Die Analyse der im Kohlenstoffgitter eingeschlossenen Isotope zeigt außerdem, dass die präsolaren Graphitteilchen unterschiedlicher Herkunft sind. Diese Teilchen können bei einer



Abbildung 3.1: Kohlenstoff– und Siliziumkarbidanteil im interstellaren Medium. Die mit AGB bzw. SNII gekennzeichneten Daten gehören zu präsolaren Staubteilchen, die in den AGB–Sternen (Asymptotic Giant Branch) bzw. bei Supernovae Typ II produziert wurden; ISM (Interstellare Materie) zeigt, wie viele Teilchen in der ISM–Wolke durch Wachstum gebildet wurden. Die linke Seite entspricht der Zeit der Entstehung des Sonnensystems (SSF steht für "solar system formation"), auf der rechten Seite sind die Werte der Sonnenumgebung in der Gegenwart gezeigt (vergl. Zhukovska u. a. 2008).

Supernovaexplosion (siehe Nittler u. a. 1996), in AGB–Sternen, oder in J–Sternen gebildet werden. SiC wird dagegen zum größten Teil in AGB–Sternen produziert. Die experimentellen Daten (siehe auch Nguyen u. a. 2007), die in Tabelle 3.1 dargestellt sind, zeigen dagegen ein fast umgekehrtes Verhältnis zwischen diesen Staubkomponenten.

In diesem Kapitel wird die Entwicklung der präsolaren Siliziumkarbidteilchen in protoplanetaren Scheiben verfolgt. Die in Meteoriten beobachteten Mengen an bestimmten Staubsorten ist das Ergebnis der chemischen Prozesse, Kollisionen und der Mischungsprozesse in der protoplanetaren Scheibe sowie der Veränderungen, die im Mutterkörper stattgefunden haben. Im Bereich, in dem sich der heutige Asteroidengürtel befindet, wurde das unveränderte Ma-

	Größe	Anteil in Meteoriten	Quelle
SiC	0.1–20µm	14–30ppm	AGB, J, SN, Nova
Graphit	1–20µm	1–10ppm	AGB, SN

 Tabelle 3.1: präsolare SiC- und Graphitteilchen in primitiven Chondriten (siehe Alexander (2009)) .

terial aus äußeren Zonen der protoplanetaren Scheibe und chemisch verändertes Material aus den inneren Bereichen der Scheibe eingemischt. Präsolare Staubteilchen sind der Regel nicht größer als einige μ m. Kleine Partikel sind gut an Gas gekoppelt und haben bei ihrer Bewegung keinen wesentlichen Einfluss von Reibung erfahren, welche bei der Teilchengrößen ab 10 μ m wichtig wird (Weidenschilling und Cuzzi 1993). Die Unterschiede in der Verteilung der präsolaren Staubkomponenten hängen also von dem Mischungsverhalten in der Scheibe nicht ab.

In dieser Arbeit wird untersucht, ob die beobachtete Menge der präsolaren Siliziumkarbidteilchen das Ergebnis von Verdampfungsprozessen in der protoplanetaren Scheibe ist. Es wird geprüft, ob Siliziumkarbid unter den Bedingungen in der Akkretionsscheibe ein stabileres Verhalten zeigt als Kohlenstoff. Wenn die Zerstörungsprozesse dieser Staubsorten bei unterschiedlichen Temperaturen ablaufen, werden die Häufigkeiten der Staubkomponenten unterschiedlich verändert. Die Staubsorte, die bei größerer Temperatur instabil wird, wird bis in Bereich näher zum Protostern erhalten bleiben. Die andere Staubkomponente wird dagegen in die warmen Bereiche nicht eindringen können. Wenn präsolare SiC–Teilchen deutlich besser als präsolare Kohlenstoffpartikel unter Bedingungen in Akkretionsscheiben bestehen können, würde es erklären, warum SiC–Teilchen häufiger in Meteoriten als Graphitteilchen beobachtet werden.

In dieser Arbeit wird die frühe Phase der Planetenentstehung simuliert. In dieser Phase sind noch keine Planetesimale gebildet. In späteren Entwicklungsphasen werden auch erste große Körper entstehen mit einem Durchmesser von über 10 km. Größere Körper werden dann durch den Zerfall von ²⁶Al erhitzt, was die Relation der Mengen der untersuchten Staubsorten beeinflussen kann. In diesem Abschnitt werden aber die Ereignisse vor der Bildung der Planetesimale untersucht. In diesem Fall sind die untersuchten Partikel klein (höchstens einige zehn μ m) und bewegen sich mit Gasgeschwindigkeiten innerhalb der protoplanetaren Scheibe. Bei dem Einmischen in warme Bereiche der Scheibe reagieren die Staubteilchen mit der sie umgebenden Gasmischung und werden dabei verdampft.

Kohlenstoff ist sehr häufig in protoplanetaren Scheiben vorhanden und ist zugleich ein effektiver Strahlungsabsorber. Aus diesem Grund muss Kohlenstoff konsistent mit dem Scheibenmodel berechnet werden. Siliziumkarbid hat dagegen keinen wesentlichen Beitrag zur Opazität und kann als Postprozessor ungekoppelt mit dem Scheibenmodell ermittelt werden.

3.2 Kohlenstoffzerstörung

Beim Einmischen in warme Bereiche der protoplanetaren Scheibe beginnen Staubverbindungen zu verdampfen. Verdampfung kann durch einfache Sublimation oder durch Reaktionen mit den umgebenden Gasen realisiert werden. Kohlenstoffpartikel verdampfen vor dem Eindringen in die Bereiche, in denen die Sublimationstemperatur herrscht. Bei ziemlich kleinen Temperaturen von ca. 800K reagieren Kohlenstoffpartikel mit sauerstoffreicher Umgebung (siehe Duschl u. a. 1996; Finocchi u. a. 1997). Als Reaktionsprodukt entsteht das sehr stabile Gas CO. Dabei werden Kohlenstoffpartikel unwiderruflich vernichtet und können nicht wieder gebildet werden. Die Tatsache, dass die Rekondensationsprozesse nicht berücksichtigt werden müssen, vereinfacht die Modellierung der Staubzerstörung.

In dieser Arbeit wird die Entwicklung von präsolaren Kohlenstoffteilchen verfolgt. Diese Teilchen sind nur ein kleiner Teil des Kohlenstoffstaubs in der interstellaren Materie, welcher vorwiegend in Molekülwolken entstanden ist (siehe u. a. Draine 1990; Jones u. a. 1996; Zhukovska u. a. 2008). Die präsolaren Staubteilchen können sich wegen unterschiedlicher Entstehungsbedingungen etwas von den anderen unterscheiden. Die chemischen Eigenschaften sind jedoch im Grunde ähnlich.

Bei der Modellierung der optischen und chemischen Eigenschaften bestimmter Staubsorten, ist es wichtig, ihre Struktur zu definieren. Hier wird ausgeschlossen, dass die Staubpartikel aus kohlenstoffhaltigem Kerogen bestehen. Diese Art der Staubpartikel, die in CI Meteoriten gefunden wurden, werden vermutlich im Mutterkörper der Meteoriten gebildet und repräsentiert damit nicht den ursprünglichen Zustand der Kohlenstoffpartikel. Die Aufnahmen der präsolaren Staubteilchen, die mit Hilfe von Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) gewonnen werden, zeigen, dass diese Staubpartikel fast kugelförmig sind. Diese Partikel bestehen aus mehreren, graphitähnlich geordneten Schichten, die aus aromatischen Sechsringen aufgebaut sind (Bernatowicz u. a. 2006). Diese Struktur ähnelt der von den Rußpartikeln, die während der Verbrennungsprozesse entstehen. Diese Ähnlichkeit erlaubt uns, die experimentellen Studien der Rußverbrennung zu benutzen.

Abb. 3.2 zeigt die partiellen Drücke der häufigsten gasförmigen Sauerstoffverbindungen. Als Oxidationspartner für amorphen Kohlenstoff könnten in erster Linie molekularer und atomarer Sauerstoff auftreten. Die Reaktionen mit diesen Gasspezies würden die Kohlenstoffpartikel am effektivsten zerstören. Beide Komponenten haben aber in der Scheibe sehr kleine Häufigkeiten. Als nächst effektive und als wahrscheinlichster Reaktionspartner treten die OH–Radikale auf (siehe Arbeiten von Duschl u. a. 1996; Finocchi u. a. 1997). Die entsprechende Reaktion ist dann (El-Gamal 1995):



Abbildung 3.2: Die partiellen Drücke einiger Gaskomponenten in der protoplanetaren Scheibe. Die gestrichelte Linie zeigt den Temperaturverlauf in der Scheibe. Die Temperaturskala befindet sich auf der rechten Seite der Abbildung. Das Scheibenmodell ist in Kapitel 1 beschrieben. Der Wert der Akkretionsrate ist $\dot{M} = 10^{-7} M_{\odot} a^{-1}$.



Durch die Reaktion werden zwei Kohlenstoffatome in der Form von HCCO in die Gasphase freigesetzt. Dabei werden die Kohlenstoffpartikel kleiner. Wenn die Partikel kugelförmig sind, dann ist die Änderung ihres Teilchenradius *a* laut Gl. (1.86)

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{car}}\alpha_{\mathrm{ox}}n_{\mathrm{OH}}v_{\mathrm{th,OH}}.$$
(3.1)

Das Volumen des Kohlenstoffatoms $V_{0,car}$ ist definiert durch $V_{0,car} = Am_H/\rho_{car}$, wobei A die atomare Masseneinheit von Kohlenstoff ist, m_H die Wasserstoffatommasse und ρ_{car} die Massendichte von festem Kohlenstoff. Die Teilchendichte der OH–Radikale und deren thermische Geschwindigkeit sind n_{OH} und $v_{th,OH}$. Die Größe α_{ox} charakterisiert die Wahrscheinlichkeit, dass die Reaktion stattfindet und wird experimentell bestimmt. In dieser Arbeit ist

 α_{ox} gleich 0.2 gemäß der Ergebnisse von El-Gamal (1995). Da bei der Reaktion zwei Kohlenstoffatome befreit werden, wird der Koeffizient durch zwei geteilt. Somit ist der in der Rechnung benutzte Koeffizient $\alpha = 0.1$. Der Ausdruck da/dt aus der Gl. (3.1) wird dann in die Transport–Diffusionsgleichung (1.93) eingesetzt.

In den Arbeiten von Finocchi u. a. (1997) und Finocchi und Gail (1997) wurde die Reaktionskinetik für O–H–Verbindungen für scheibenähnliche Bedingungen gerechnet. Aus den Rechnungen folgt, dass sich das Gebiet, in dem die Oxidation stattfindet (ab 1000K), gut mit Gleichgewichtsrechnungen beschreiben lässt. Aus diesem Grund kann die Häufigkeit von OH aus einer Gleichgewichtsrechnung bestimmt werden.

Kohlenstoff kann in sauerstoffreicher Umgebung nicht wieder kondensieren. Auf diese Weise bleiben nur die Konzentrationen c_i und c_{i+1} aus Gl. (1.93) gekoppelt. D. h., dass die Gleichung direkt für das Größenintervall $[a_{I-1}, a_I]$ ohne Kenntnis über das Größenintervall $[a_{I-2}, a_{I-1}]$ gelöst werden kann.

Da die Temperatur im Innern der Scheibe sehr hoch ist und die OH–Konzentration auch ziemlich hoch ist (siehe Abb. 3.2), wird Kohlenstoff in der Nähe des Protosterns vollständig verdampft. Das bedeutet für die innere Randbedingung:

$$c_i = 0$$
, für $i = 1, \dots, I - 1$. (3.2)

In äußeren Bereichen der Scheibe ist der Abstand zum Protostern so groß und die Temperatur so niedrig (ca. 10K), dass die Staubpartikel noch in unveränderter Form vorkommen, d. h. die Konzentration der Kohlenstoffpartikel im äußeren Rand der Scheibe gleicht der in der Molekülwolke. Hierbei wird angenommen, dass die Größenverteilung der kleinen präsolaren Staubteilchen in der ISM der MRN–Verteilung zumindest ähnelt. Die Potenz von –3.5 in der MRN–Verteilung charakterisiert die Verteilung, die durch Stoßprozesse zwischen den Teilchen entsteht. Jones u. a. (1996) zeigte, dass die Zusammenstöße der Kohlenstoffpartikel der Hauptzerstörungsmechanismus dieser Teilchen in der ISM sind. Demzufolge wird die MRN– Größenverteilung sowohl für Kohlenstoff– als auch für SiC–Partikel mit kleinem Durchmesser angenommen. Die Arbeit von Zubko u. a. (2004) zeigte zwar einige Abweichungen zum MRN–Gesetz in der Größenverteilung, aber die Form der Verteilung bleibt im wesentlichen gleich der MRN–Verteilung.

Große Partikel haben eine etwas andere Verteilung als kleine Partikel. Hier wird angenommen, dass die Verteilung der großen Teilchen, die in Meteoriten experimentell beobachtet wird, die ursprüngliche Verteilung im interstellaren Medium widerspiegelt. Die Arbeit von Daulton u. a. (2003) zeigt, dass größere SiC–Teilchen dem Potenzgesetz $a^{-4.5}$ folgen. Die Anzahl der größeren Teilchen fällt also steiler als die der kleinen Teilchen ab. Diese Verteilung wird in dieser Arbeit auch für große Kohlenstoffpartikel angewendet. Die resultierende Größenverteilung ist dann

$$f(a) = \begin{cases} 0 & \text{für } a > a_l \\ K_1 a^{-3.5} & \text{für } a_l \le a \le a_m \\ K_2 a^{-4.5} & \text{für } a_m < a \le a_u \\ 0 & \text{für } a_u < a \end{cases}$$
(3.3)

Hierbei ist $a_l = 0.005 \mu m$, $a_m = 0.25 \mu m$ und $a_u = 10 \mu m$. Die Konstante K_2 ergibt sich aus der Kontinuitätsbedingung $K_2 = a_m K_1$. K_1 wird aus der Normierung

$$\int_{a_l}^{a_u} \frac{4\pi}{3} a^3 f(a) da = V_0 f_{\text{car},0} \epsilon_{\text{C}}$$
(3.4)

bestimmt. Hierbei ist $\epsilon_{\rm C}$ die gesamte Häufigkeit von Kohlenstoffatomen normiert auf die Anzahl der Wasserstoffatome, und $f_{\rm car,0}$ ist der Kohlenstoffanteil, der in kondensierter Form in der ursprünglichen Molekülwolke vorliegt. Die Randbedingungen für den äußeren Rand sind dann für jeden Größenbereich durch die Gleichungen

$$c_{i} = \int_{a_{i}}^{a_{i+1}} f(a)da$$
(3.5)

definiert. Der Kondensationsgrad f_{car} zeigt, welcher Anteil von Kohlenstoff in kondensiertem Zustand vorhanden ist. Er kann bei der Lösung von Gl. (1.93) für jede Position in der protoplanetaren Scheibe ermittelt werden:

$$f_{\rm car} = \frac{1}{V_0 \epsilon_{\rm C}} \sum_{i=1}^{I-1} c_i \frac{4\pi}{3} {a_i}^3 \,. \tag{3.6}$$

Der Kondensationsgrad wird zum Bestimmen des Opazitätsbeitrags von Kohlenstoffpartikeln in der Scheibe benötigt. Da Kohlenstoff ein wichtiger Absorber ist, wird seine Verdampfung konsistent mit dem Scheibenmodel simuliert. Dabei wird der Wert von $f_{car,0}$ auf den Wert in der ISM von $f_{car,0} = 0.6$ gesetzt.

Um die Zerstörungsmechanismen der hier untersuchten Staubspezies besser vergleichen zu können, wird die Linearität der Diffusions–Transport–Gleichung (1.93) genutzt. Damit die Randwerte der Koeffizienten $f_{car,0}$ und $f_{SiC,0}$ einen gleichen Wert annehmen, wird die Lösung der Gleichung (1.93) mit einer Konstante multipliziert. Dadurch erhält man die Lösung für eine andere Randbedingung. Die beiden Kondensationsgrade werden zur besseren Anschaulichkeit auf eins gesetzt: $f_{car,0} = 1$ und $f_{SiC,0} = 1$.

3.3 Zerstörung von Siliziumkarbid

Die Arbeit von Lewis u. a. (1979) zeigte, dass Siliziumkarbid in sauerstoffreicher Umgebung nicht gebildet werden kann. Das bedeutet, dass verdampfte SiC–Teilchen nach der Verdampfung in protoplanetaren Scheiben nicht wieder kondensieren können. Die Konzentration der präsolaren SiC–Teilchen wird also durch die Verdampfung in inneren Bereichen der Scheibe und durch die Mischungsprozesse in der Scheibe beeinflusst.

Bei der Modellierung der Verdampfung der präsolaren SiC–Teilchen werden genau wie im Fall der Kohlenstoffverdampfung experimentelle Befunde benötigt. Die Wechselwirkung der Siliziumkarbidteilchen mit einer Gasmischung, die der Zusammensetzung in protoplanetaren Scheiben ähnelt, wurde in der Arbeit von Mendybaev u. a. (2002) untersucht.

Im Versuch wurden Massenverlustraten von SiC–Proben unter Wechselwirkung mit einer Experimentalatmosphäre gemessen. Dabei wurden unterschiedliche Gasmischungen untersucht. Im Experiment waren unterschiedliche Verhältnisse zwischen den partiellen Drücken CO₂ und H₂ eingestellt. Die Bedingungen im Experiment waren derart, dass sich ein thermodynamischer Gleichgewichtszustand im System einstellt. Das bedeutet, dass die partiellen Drücke aller Gaskomponenten mit einer Gleichgewichtsrechnung bestimmt werden können. Die Experimente wurden bei der Temperatur von 1300°C (1573.15 K) und bei dem Gesamtdruck der Experimentalatmosphäre von 1 atm (1.0133 bar) durchgeführt. Diese Bedingungen werden in dieser Arbeit nachmodelliert. Es ist vorausgesetzt, dass die Gasphase aus H₂O, CO, H₂, H, CH₄, CO₂, OH, CH₂O, SiO, C₂H₂, CH₃, SiH₄, SiH und Si besteht. Bevor die SiC–Probe der Gasmischung ausgesetzt worden ist, bestand die Gasmischung aus H–, C– und O–haltigen Molekülen. Die Modellierung der Gleichgewichtskomposition benötigt einige thermodynamische Daten (siehe Abschnitt 1.2), diese wurden aus Barin (1995) und NIST (2008) genommen.

Zunächst wird die experimentelle Atmosphäre ohne Festkörper untersucht. In diesem Fall wird das Gleichgewicht in der Gasphase eingestellt, die aus H₂O, CO, H₂, H, CH₄, CO₂, OH, CH₂O, C₂H₂, C₂H₄, CH₃ besteht. In diesem Fall kann die Teilchenmengenbilanz mit folgenden Gleichungen beschrieben werden:

$$P_{\rm H} = 2p_{\rm H_2} + 2p_{\rm H_2O} + p_{\rm H} + p_{\rm OH} + 2p_{\rm CH_2O} + 4p_{\rm CH_4}$$
(3.7)
+ $2p_{\rm C_2H_2} + 3p_{\rm CH_3} + 4p_{\rm C_2H_4}$

$$P_{\rm O} = p_{\rm H_2O} + p_{\rm CO} + 2p_{\rm CO_2} + p_{\rm OH} + p_{\rm CH_2O} + 2p_{\rm O_2} + p_{\rm O}$$
(3.8)

$$P_{\rm C} = p_{\rm CO} + p_{\rm CO_2} + p_{\rm C} + p_{\rm CH_2O} + p_{\rm CH_4} + 2p_{\rm C_2H_2}$$
(3.9)

$$+ p_{CH_3} + 2p_{C_2H_4} p_{H_2} + p_{H_2O} + p_{CO} + p_{CO_2} + p_{H} + p_{CH_4} + p_{OH} + p_{O_2} + p_{O}$$
(3.10)
$$+ p_{CH_2O} + p_{C_2H_2} + p_{CH_3} + p_{C_2H_4} = 1 \text{atm}.$$

Mit den großen *P* sind die fiktiven Drücke der Atomen bezeichnet und die kleinen *p* stehen für die partiellen Drücke der Moleküle. Die ersten drei Gleichungen beschreiben die Teilchenmengen der Atome in den wasserstoffhaltigen, sauerstoffhaltigen und kohlenstoffhaltigen Molekülen. Die vierte Gleichung beschreibt den Gesamtdruck aller Molekülkomponenten.

Als nächstes wird die SiC–Probe in die H–C–O–Gasmischung gestellt. Während des Einstellens des Gleichgewichts wird die Gasmischung verändert. Als Folge der Verdampfungsvorgänge kommen zur vorherigen Gasmischung noch Si–haltige Moleküle dazu. Diese sind SiO, SiH₄, SiH und Si. Außerdem werden neue feste Verbindungen gebildet. Je nach Sauerstoffgehalt wird das feste Si oder Quarz entstehen. Falls die Bedingungen für die Bildung der Feststoffe günstig sind und sich ein chemisches Gleichgewicht einstellt, wird die Aktivität gleich eins. Zu den oben beschriebenen Gleichungen kommt noch die Teilchenbilanz für siliziumhaltige Komponenten hinzu: Das Gleichungssystem für die Gasmischung mit Festkörperkomponenten ist

$$P_{\rm H} = 2p_{\rm H_2} + 2p_{\rm H_2O} + p_{\rm H} + p_{\rm OH} + 2p_{\rm CH_2O} + 4p_{\rm CH_4}$$
(3.11)

 $2p_{C_2H_2} + 3p_{CH_2} + 4p_{C_2H_4} + p_{SiH} + 4p_{SiH_4}$

$$P_{\rm O} = p_{\rm H_2O} + p_{\rm CO} + 2p_{\rm CO_2} + p_{\rm OH} + p_{\rm CH_2O} + 2p_{\rm O_2} + p_{\rm O}$$
(3.12)

+
$$p_{\rm SiO}$$
 + $2\tilde{p}_{\rm SiO_2}$

$$P_{\rm C} = p_{\rm CO} + p_{\rm CO_2} + p_{\rm C} + p_{\rm CH_2O} + p_{\rm CH_4} + 2p_{\rm C_2H_2} + p_{\rm CH_3}$$
(3.13)
+ $2p_{\rm C_2H_4} + \tilde{p}_{\rm SiC}$

$$P_{\rm Si} = p_{\rm SiH} + p_{\rm Si} + p_{\rm SiH_4} + p_{\rm SiO} + \tilde{p}_{\rm Si} + \tilde{p}_{\rm SiC} + \tilde{p}_{\rm SiO_2}$$
(3.14)

$$p_{\rm H_2}$$
 + $p_{\rm H_2O}$ + $p_{\rm CO}$ + $p_{\rm CO_2}$ + $p_{\rm H}$ + $p_{\rm CH_4}$ + $p_{\rm OH}$ + $p_{\rm O_2}$ + $p_{\rm O}$ (3.15)

+
$$p_{CH_2O}$$
 + $p_{C_2H_2}$ + p_{CH_3} + $p_{C_2H_2}$ + p_{CH_3} + $p_{C_2H_4}$
+ p_{SiH} + p_{SiH_4} + p_{SiO} + p_{Si} = 1atm

Bei der Modellierung der Gasmischung mit der Siliziumkarbidprobe wurde der Molanteil des SiC–Substrates gleich dem Molanteil der Gase H₂ und CO₂ gesetzt. Da bei dem zweiten Versuchsaufbau Festkörper im System vorhanden sind, werden noch zusätzliche Größen \tilde{p}_{Si} , \tilde{p}_{SiC} und \tilde{p}_{SiO_2} eingeführt. Diese Größen stehen für die Teilchenmengen von Silizium, die in Form von festem Silizium, Siliziumkarbid und Quarz vorhanden sind. Diese Größen sind unbekannt, sie ergeben sich aus der Rechnung. Wenn die berechneten Größen negativ werden, bedeutet es, dass der entsprechende Festkörper im Gleichgewicht nicht existieren kann.

Die Pseudoaktivitäten werden gleich eins, wenn die entsprechenden Festkörper bei der vorgegebenen Fugazität im chemischen Gleichgewicht existieren:

$$\hat{a}_{\rm SiC} = p_{\rm Si} p_{\rm C} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm SiC}}{R_g T}\right)$$
 (3.16)

$$\hat{a}_{\rm SiO_2} = p_{\rm Si} p_{\rm O}^2 \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm SiO_2}}{R_g T}\right)$$
(3.17)

$$\hat{a}_{\rm Si} = p_{\rm Si} \exp\left(-\frac{\Delta G_{\rm Si}}{R_g T}\right).$$
 (3.18)

Die Gleichungen (3.16)–(3.18) beschreiben Aktivitäten \hat{a} von Festkörpern. Falls die Aktivität gleich eins ist, ist entsprechendes Substrat in festem Zustand vorhanden. Ist \hat{a} kleiner als eins, ist der Festkörper nicht im Gleichgewicht und verschwindet via Verdampfung. Der Fall von \hat{a} größer als eins entspricht einem Wachstumsprozess von dem Festkörper.

Bei der Modellierung der Gleichgewichtszusammensetzungen wird das Verhältnis p_{CO_2}/p_{H_2} bei jedem Simulationsschritt festgelegt. Dieser Wert wird von 10⁻⁶ bis 1 variiert. Die fiktiven Drücke von Sauerstoff und von Kohlenstoff lassen sich durch dieses Verhältnis und durch den fiktiven Druck von Wasserstoff ausdrücken. Wird der Ausdruck p_{CO_2}/p_{H_2} mit einer Hilfsvariable *x* ersetzt, dann gilt

$$\frac{p_{\rm CO_2}}{p_{\rm H_2}} = \frac{P_{\rm O}}{P_{\rm H}} = \frac{P_{\rm C}}{0.5P_{\rm H}} = x \tag{3.19}$$

Damit ist das Gleichungssystem für eine Gasmischung ohne Festkörper auf die vier Unbekannten $P_{\rm H}$, $p_{\rm H}$, $p_{\rm C}$ und $p_{\rm O}$ reduziert. *x* ist der Parameter, der variiert wird.

Bei dem System mit der SiC–Probe ist wie im Experiment der Molenanteil von SiC gleich dem Molenanteil der Gase CO₂ und H₂. Dann gilt

$$\frac{N_{\rm Si}}{N_{\rm CO_2} + N_{\rm H_2}} = \frac{N_{\rm Si}}{N_{\rm H_2}(1 + x)} = 1.$$
(3.20)

Hierbei sind mit *N* die Teilchendichten der entsprechenden Komponenten bezeichnet. Diese können in einer Relation durch fiktive Drücke ersetzt werden. Dann ergibt sich

$$\frac{P_{\rm Si}}{0.5P_{\rm H}} = 1 + x. \tag{3.21}$$

Auf dieser Weise erhalt man ein System mit 8 Gleichungen und 8 Unbekannten $P_{\rm H}$, $p_{\rm H}$, $p_{\rm C}$, $p_{\rm O}$, $p_{\rm Si}$, $\tilde{p}_{\rm Si}$, $\tilde{p}_{\rm SiC}$ und $\tilde{p}_{\rm SiO_2}$.

Beide Systeme, mit der reinen Gasmischung so wie mit der Gasmischung und Siliziumkarbid, wurden in der Arbeit modelliert. Die Gleichungen wurden mit der NEWTON-RAPHSON-Methode gelöst. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind für die H–C–O Gasmischung in Abb. 3.3 und für die Gasmischung mit Festkörper in Abb. 3.4 dargestellt.

Im Experiment hat sich bei der Einstellung des Gleichgewichts eine H–C–O–Gasmischung gebildet, die die in protoplanetaren Scheiben häufigsten Gasspezies enthält (vergl. Abb. 3.3 und Abb. 3.2). Die SiC–Probe wurde dieser H–C–O–Gasmischung ausgesetzt und reagierte mit den Gasen. In Abhängigkeit davon, welches Verhältnis von CO₂/H₂ eingestellt wurde, bildeten sich verschieden Reaktionsprodukte in kondensiertem Zustand: entweder Silizium oder eine Quarzschicht an der Oberfläche der Probe. In der Abb. 3.4 sind drei Bereiche mit gestrichelten vertikalen Linien von einander getrennt. Diese zeigen drei Gleichgewichtskonfigurationen, in denen unterschiedliche Festkörper gebildet werden. Der linke Bereich, der mit "Si" gekennzeichnet ist, entspricht der sauerstoffärmsten Gasmischung. Die Gasspezies reagieren mit Siliziumkarbid, dabei bleibt als Reaktionsrückstand festes Silizium an der Oberfläche der Probe. In der Probe. In der Probe. In der Mober-fläche der Probe. In der Probe. In der Oberfläche der Probe. Silizium an der Oberfläche der Probe. In der Probe. In der Silizium an der Oberfläche der Probe. In der Probe. In der Silizium an der Oberfläche der Probe. In dieser Phase existieren also zwei Festkörper SiC und Si. In dem mittleren



Abbildung 3.3: Gleichgewichtspartialdrücke für die Gasmischung H_2 -CO₂ bei einer Temperatur von 1300°C (1573.15 K). Modelliert ist die Gasmischung ohne Festkörper im Experiment von Mendybaev u. a. (2002). Auf der linken Ordinate sind die partiellen Drücke aufgetragen. Auf der rechten Ordinate ist die Skala für die Fugazität log fO_2 abgebildet. Auf der Abszisse sind die Verhältnisse von partiellen Drücken von CO₂ und H₂ aufgetragen.

Bereich gibt es mehr sauerstoffhaltige Substanzen aber diese sind nicht häufig genug, um eine Passivierungsschicht an der Oberfläche von SiC zu bilden. Unter diesen Bedingungen wird kein weiterer Festkörper gebildet: SiC befindet sich im Gleichgewicht mit der Gasphase. Im dritten, rechten Bereich "SiC+SiO₂" existieren ausreichend viele sauerstoffhaltige Moleküle, um eine Passivierungsschicht an der Oberfläche des Substrates zu bilden. Die Passivierungsschicht besteht aus Quarz, dessen Verdampfung die Verdampfungsrate der Probe bestimmt.

Wie auf den Abbildungen 3.3 und 3.4 zu sehen ist, gibt es vier häufige sauerstoffhaltige Moleküle, die für die Verdampfung von SiC verantwortlich sein können. Das sind H₂O, CO, CO₂ and O₂. In der Arbeit von Mendybaev u. a. (2002) ist die Massenverlustrate in Ahängigkeit von der Sauerstofffugazität f_{O_2} (= p_{O_2} für ideale Gase) bestimmt. Der molekulare Sauerstoff ist von diesen drei Gassubstanzen das effektivste Oxidatiosmittel. Er ist aber im Experiment praktisch nicht vorhanden (siehe Linie, die mit log f O₂ in Abb. 3.3 markiert ist).

Die nächste Gaskomponente, die für die Oxidationsvorgang verantwortlich sein könnte, ist



Abbildung 3.4: Gleichgewichtszusammensetzung der Gase und Festkörper in dem Versuchsaufbau mit SiC–Probe, die der Gasmischung H₂-CO₂ bei der Temperatur von 1300°C (1573.15 K) ausgesetzt wird (siehe Mendybaev u. a. 2002). Die Ordinate zeigt die Werte von partiellen Drücken der Gase aus der Gasmischung. Die Abszisse entspricht den vorgegebenen Verhältnissen der partiellen Drücken von CO₂ zu H₂. Im System sind die Molzahlen von festem SiC und der Gase H₂+CO₂ einander gleich. Der Gesamtdruck im System ist gleich 1atm.

$\log(p_{O_2})$	$\log(p_{\rm H_2O})$ [bar]	$J_{i(\exp)}[g/s/cm^2]$
-16.93	$7.21 \cdot 10^{-4}$	0.00084
-17.43	$4.06 \cdot 10^{-4}$	0.0012
-19.63	$3.23 \cdot 10^{-5}$	0.0036
-21.13	$5.74 \cdot 10^{-6}$	0.009

Tabelle 3.2: Massenverlustrate. Experiment von (Mendybaev u. a. 2002).

Wasserdampf. Diese Moleküle sind laut der Rechnung bei allen vorgegebenen Verältnissen von p_{CO_2} zu p_{H_2} häufig vorhanden. Eine mögliche Reaktion von SiC mit Wasserdampf wäre dann

$$SiC_{(s)} + 2H_2O_{(g)} \rightarrow SiO_{(g)} + CO_{(g)} + 2 H_{2(g)}.$$

Anscheinend hängt die Massenverlustrate von dem partiellen Druck des Wasserdampfes in Form eines Potenzgesetzes ab:

$$R_{\text{destr}} = k_{\text{Arrh}} \cdot p_{\text{H}_2\text{O}}{}^b.$$
(3.22)

Die Zerstörungsrate lässt sich mit Hilfe des Arrhenius-Gesetzes schreiben:

$$k_{\rm Arr} = A \exp\left(-\frac{E_{\rm a}}{R_{\rm g} {\rm T}}\right). \tag{3.23}$$

Hierbei ist R_g die universelle Gaskonstante und T ist die Temperatur. Die Temperatur im Experiment war 1573.15 K. Bei der gewählten Form der Rate hat der Vorfaktor A eine Dimension [g/(cm²s)·bar^{-b}]. E_a ist die Aktivierungsenergie der Reaktion, die im Experiment von Mendybaev u. a. (2002) zu $E_a = 563 \pm 8$ kJ/mol bestimmt wurde. p_{H_2O} ist der partielle Druck des Wasserdampfes.

Die Werte des Vorfaktors A und der Potenz b sind in der Arbeit von Mendybaev u. a. (2002) nicht explizit angegeben. Aber diese Größen lassen sich aus den gemessenen Daten ableiten. Die Tabelle 3.2 zeigt die im Labor bestimmte Massenverlustrate als Funktion des partiellen Drucks des Sauerstoffs p_{O_2} . In die zweite Spalte sind dann die dazu entsprechenden berechneten Werte von partiellem Druck des Wasserdampfes eingetragen, denn es wurde angenommen, dass Wasserdampf für die Zerstörung von SiC verantwortlich ist. Die Werte von A und b werden aus dem Fit der experimentellen Daten mit einer ARRHENIUS–Form der Ratenkoeffizienten bestimmt.

Die Werte, die aus dem Fitt der experimentellen Daten gewonnen sind, sind $A = \exp(32.53) = 1.341527 \cdot 10^{14}$ und b = -0.48. Die gerechnete Arrheniusrate ist auf der Abb. (3.5) mit einer Linie abgebildet. Die experimentelle Werte sind mit Kreuzen markiert.

Um die Genauigkeit der Rechnung zu verbessern, wurde auch die kleinstmögliche (innerhalb der Messfehler) Rate modelliert. Die Werte für die kleinstmögliche experimentelle Rate sind in der Tabelle 3.3 eingetragen. Die Werte für die ARRHENIUS-Konstanten wurden zu $A = \exp(33.24)$ und b = -0.39 bestimmt. Mit diesen Werten kann man die maximal mögliche Konzentration von SiC abschätzen. Die daraus folgenden Ergebnisse zeigten keinen merklichen Unterschied zu den Ergebnissen mit den Werten aus der Tabelle 3.2. Aus diesem Grund werden die Rechnungen, die mit den Werten aus der Tabelle 3.3 erstellt wurden, hier nicht angezeigt.



Abbildung 3.5: Die experimentell bestimmte Massenverlustrate als Funktion des partiellen Drucks des Wasserdampfes. Mit den Punkten sind die experimentellen Werte markiert. Die Linie zeigt die mit einem Arrhenusgesetz approximierte Massenverlustrate. Für die Konstante A wurde ein Wert von $1.34 \cdot 10^{14}$ bestimmt und für b der Wert –0.48. Die Aktivierungsenergie E_a wurde im Experiment zu 563 ± 8 kJ/mol bestimmt.

$\log(p_{O_2})$	$\log(p_{\rm H_2O})$ [bar]	$J_{i(\exp)}[g/s/cm^2]$
-16.93	$7.21 \cdot 10^{-4}$	0.00084
-17.43	$4.06 \cdot 10^{-4}$	0.0012
-20.13	$1.82 \cdot 10^{-5}$	0.0036
-22.13	$1.82 \cdot 10^{-6}$	0.009

Tabelle 3.3: Die innerhalb der Messfehler kleinstmögliche Massenverlustrate (Mendybaevu. a. 2002)

Bei der Modellierung der Verdampfungsprozesse der präsolaren Staubteilchen wird ein stationäres Scheibenmodell (Gail 2004) verwendet. Die partiellen Drücken der Sauerstoffmoleküle sind in der Scheibe sehr niedrig (siehe Abb 3.2). Der sehr niedrige Wert des partiellen Drucks von O_2 bei der Temperatur von ca. 1 000 K in der Akkretionsscheibe entspricht den Werten im Versuchsaufbau, bei denen keine Passivierungsschicht aus Quarz an der Oberfläche von Siliziumkarbid gebildet wird. Siliziumkarbid wird also durch die Reaktion mit Wasserstoffdampf direkt zerstört.

Die Zerstörungsrate von SiC ist eine Funktion der Temperatur, die aus dem Modell der protoplanetaren Scheibe genommen wird. Die Änderung des Partikelradius *a* für Siliziumkarbid wird analog zu der von dem Kohlenstoff (siehe Gl. (3.1)) bestimmt.

$$\frac{da}{dt} = \frac{\mathbf{k}_{\mathrm{Arrh}} p_{\mathrm{H}_2\mathrm{O}}^b}{\rho_{\mathrm{SiC}}},\qquad(3.24)$$

hierbei ist *k* der Ratenkoeffizient, der mit Gl. (3.23) definiert ist. Alle Rechnungen für Siliziumkarbid sind auf die gleiche Weise durchgeführt, wie sie für präsolare Kohlenstoffpartikel gemacht wurden. In der Rechnung werden für eine bessere Anschaulichkeit gleiche Randbedingungen Gl. (3.5) gewählt. So können die Ergebnisse der beiden Rechnungen für Zerstörung, Mischung und Diffusion der Spezies leichter verglichen werden. Die korrekten Werte können beim Skalieren mit dem Faktor $f_{SiC,0}\epsilon_{Si}$ für SiC oder mit $f_{car,0}\epsilon_{C}$ für Kohlenstoff erhalten werden.

3.4 Ergebnisse

In dieser Arbeit ist erforscht, wie präsolare Graphit– (Kohlenstoff–) und präsolare Siliziumkarbidteilchen beim Einmischen in die warme Bereiche der protoplanetaren Scheibe oxidiert und zestört werden. Dabei wurde verfolgt, wie Partikel mit unterschiedlichen Größen sich durch Diffusions– und Advektionsprozesse verteilen. Dafür wurden die Gln. (1.93) für ein eindimensionales stationäres Scheibenmodell (siehe Kapitel 1.1.1) gelöst. Das Scheibenmodell erfasst den Bereich zwischen 5 Sonnenradien bis 100AU.

Für die Rechnung wurden typische Werte für Scheibenparameter eingesetzt. Die Akkretionsrate \dot{M} beträgt $10^{-7}M_{\odot}/a$. Das ist ein typischer Wert für ein sonnenähnliches System, das nicht älter als 1 Million Jahre ist. Es ist angenommen, dass Planetesimale ungefähr zu dieser Zeit entstehen. Das Scheibenmodell liefert die notwendigen Größen v_r , n, D, T, n_{OH} , und n_{H_2O} für die Lösung der Gln. (1.93). Die Zerstörung der Staubspezies, die durch die Festkörper–Gas–Reaktion erfolgt, wird unabhängig vom Scheibenmodell als Postprozessor modelliert. Aus den erhaltenen Werten der Konzentrationen, die für jedes Größenintervall berechnet werden, wird der Kondensationsgrad für präsolare Kohlenstoffteilchen (Graphit-



Abbildung 3.6: Der normierte Kondensationsgrad von Siliziumkarbid (gestrichelte Linie) und von Kohlenstoff (durchgezogene Linie) als Funktion des Abstandes zum Protostern. Die obere Grenze der gefüllten Fläche zeigt das Temperaturprofil in der Mittelebene der Scheibe, die dazu gehörige Ordinate befindet sich rechts.

teilchen) und für präsolare Siliziumkarbidteilchen mit Gl. (3.6) berechnet. Dieser zeigt, welcher Teil der präsolaren Staubteilchen unter den Bedingungen in der Scheibe überleben kann.

Die Ergebnisse der Simulation sind in der Abb. 3.6 dargestellt. Der Kondensationsgrad ist bei den beiden Staubsorten so normiert, dass sein Wert am äußeren Rand der Scheibe gleich 1 ist. Der Kondesationsgrad von präsolaren Kohlenstoffteilchen ist mit einer durchgezogenen Linie gezeigt. Die gestrichelte Linie entspricht dem Wert des Kondensationsgrads des Siliziumkarbids, während die Abszisse den radialen Abstand zum Stern abbildet. Der Temperaturverlauf ist mit der obersten Grenze der gefüllten Fläche dargestellt, dessen Werte in Kelvin auf der rechten Seite der Abbildung zu sehen sind. Beide untersuchten Staubkomponenten sind instabil in warmen Bereichen der Scheibe, in denen sie durch die Reaktion mit sauerstoffhaltigen Gasspezies, mit OH–Radikalen bzw. mit Wasserdampf, zerstört werden. Kohlenstoff– und Siliziumkarbidteilchen werden im Temperaturbereich von 1 000 K und 1 100 K oxidiert. Aufgrund der Mischungsprozesse in der protoplanetaren Scheibe sind die Konzentrationen der Staubkomponenten auch in äußeren Bereichen der Scheibe deutlich gesunken. Die Strömungen in der Scheibe bringen das staubfreie Material aus inneren, warmen Scheibenteilen in die kühleren Teile der Scheibe, was die Konzentration der Teilchen in der ganzen Scheibe verdünnt. Durch Einfluss der Advektions– und Diffusionsprozesse bildet sich ein Konzentrationsprofil (siehe Abb. 3.7), bei welchem die Konzentration kontinuierlich von dem äußerem zum innerem Rand der Scheibe abfällt. Am inneren Rand sind die Staubpartikel komplett verdampft.



Abbildung 3.7: Das Teilchengrößenspektrum von präsolaren Graphitteilchen (obere Reihe) und von Siliziumkarbidteilchen (untere Reihe). Die Abszisse zeigt den Abstand zum Protostern, die Ordinate ist der Teilchenradius in cm. Die Farbenskala steht für die Konzentration der Teilchen (siehe Gl. (3.5)). Die Randbedingungen an der äußeren Scheibengrenze sind bei der Teilchengrößenverteilung, Gl. (3.3), vorgegeben.

Der Kondensationsgrad von präsolarem Kohlenstoff hat einen sehr ähnlichen Verlauf wie der von präsolarem SiC (siehe Abb. 3.6). Obwohl sich die Kondesationsgrade dieser Staubkomponenten etwas unterscheiden, ist dieser Unterschied nicht wesentlich. Die beiden Staubsorten oxidieren mit etwa gleicher Geschwindigkeit unter ähnlichen Bedingungen im Bereich von ca. 0.5 bis ca. 0.6 AU. Die Zerstörungmechanismen von präsolaren Siliziumkarbidteilchen und präsolaren Kohlenstoffteilchen haben also ähnlichen Charakter in protoplanetaren Scheiben. Wenn die Oxidationsreaktionen tatsächlich die effektivsten Zerstörungsmechanismen dieser Staubsorten sind, sollte das Verhältnis zwischen den Mengen des präsolaren Kohlenstoffs und des präsolaren Siliziumkarbids in protoplanetaren Scheiben genau so wie im ISM bleiben.

Um einen besseren Eindruck über Verdampfungsprozesse in der Scheibe zu gewinnen, werden die Konzentrationsprofile der Staubpartikel detaillierter untersucht. In Abbildung 3.7 sind die Teilchengrößenverteilungen der präsolaren Kohlenstoff– und Siliziumkarbidteilchen in dreidimensionaler Darstellung gezeigt. Hierbei ist die Konzentration mit einer Farbenskala abgebildet. Die Konzentrationsprofile sind als Projektion auf die a–R–Fläche und dreidimensional dargestellt. Die Anfangsverteilung (am äußerem Rand R = 100 AU) ist für beide Komponenten gleich. Je heller die Farbe in den Abbildungen ist, desto größer ist die Konzentration der Teilchen.

Erwartungsgemäß überleben die kleinsten Partikel in warmen Bereichen der Scheibe nicht. Größere Partikel überleben aufgrund der höheren Masse besser. Die größten Teilchen werden allerdings aufgrund der größeren Oberfläche am effektivsten zerstört. Damit beträgt der am häufigsten vertreten der Partikelradius $5 - 6 \cdot 10^{-7}$ cm für beiden untersuchten Spezies, für Kohlenstoff und für Siliziumkarbid. Die Abbildungen (3.7) bestätigen, dass die Zertörungsmechanismen der beiden Spezies sehr ähnlich sind.

Zu besserer Anschaulichkeit werden die Konzetrationswerte für ausgewählte Abstände zum Protostern als Funktion der Partikelgröße aufgetragen. Die Abbildung 3.8 zeigt die Konzentration in logarithmischer Skala. Jede Linie entspricht einem festen Abstand zum Protostern und ist mit der entsprechenden Zahl in AU gekennzeichnet. Auf der linken Seite der Abbildung ist die Konzentration von Kohlenstoff und auf der rechten Seite die Konzentration von Siliziumkarbid gezeigt. Die gestrichelte Linie zeigt die Anfangsverteilung der beiden Staubkomponenten am Rand des Systems. Wie es in Gl. (3.3) beschrieben ist, fällt die Konzentration der Partikel mit kleinen Radien proportional zu $a^{-3.5}$ und mit großen Radien proportional zu $a^{-4.5}$ in der Entfernung zum Stern von 100 AU.

Entsprechend der vorgegebenen Anfangsverteilung befindet sich das Maximum der Konzentration bei Partikeln mit einem Radius von ca. 10^{-6} cm. Bei der Annäherung zum Stern verschiebt sich das Maximum zu den größeren Radien, weil die kleinen Partikel schneller zerstört werden. Das Maximum kann aber nicht den maximalen Radius 10^{-3} cm erreichen, weil keine größeren Partikel im Modell existieren, die bei ihrer Verdampfung eine Quelle für die Partikel mit dem Radius 10^{-3} cm wären.

Bei der Betrachtung der Abb. (3.8) kann die Konzentrationsänderung von Kurve zu Kurve bei Annäherung zum Protostern verfolgt werden. Die Konzentration der präsolaren Kohlenstoffpartikel ändert sich kontinuierlich von ca. 10^{-1} beim Abstand von 1.1AU zu ca. 10^{-14} beim Abstand von 0.35 AU. Die Konzentration der präsolaren Siliziumkarbidteilchen hat einen steileren Verlauf. Innerhalb des kleinen Intervalls von 1.1AU bis 0.59AU sinkt die Konzentration von SiC von 10^{-14} bis 10^{-14} . Das bedeutet, dass Siliziumkarbid schnell verdampft,



Abbildung 3.8: Das Teilchengrößenspektrum von präsolarem Kohlenstoff (oben) und von präsolarem SiC (unten). Die Abszisse ist der Abstand zum Protostern, die Ordinate ist der Teilchenradius in cm. Jede Linie entspricht einem ausgewählten Abstand zum Stern, der mit entsprechenden Zahlen gekennzeichnet ist. Die Anfangsverteilung ist durch Gl. (3.3) vorgegeben.

sobald es in die warmen Bereiche der Scheibe eingemischt wird.

Der Oxidationsvorgang hängt von der Dichte der Sauerstoffträger ab. Siliziumkarbid reagiert mit dem Wasserdampf. Wie es in Abb. (3.2) zu sehen ist, ist Wasserdampf im Bereich bis 1 AU ziemlich häufig. Das bedeutet, es gibt immer genug Wasserdampf in den warmen Bereichen der Scheibe. So lange die notwendige Temperatur erreicht wird, kann Siliziumkarbid effektiv zerstört werden. Das verursacht die steile Abnahme der Konzentration der präsolaren SiC-Teilchen in Abb. (3.8).

Der Kohlenstoff reagiert mit den OH–Radikalen. Diese sind nur bis zum Abstand von ca. 0.7 AU in ausreichenden Mengen vertreten (siehe Abb. (3.2)). Das bedeutet, dass Kohlenstoff etwas näher zum Protostern eindringen kann, bis er effektiv abgebaut wird. Die Konzentration in weiteren Bereichen der Scheibe wird durch die Mischung beeinflusst. Das erklärt die kontinuierliche Abnahme der Konzentration von Kohlenstoff in Abb. (3.8).

Aus der Abb. (3.8) folgt, dass die beiden Staubsorten in den äußeren Teilen der Scheibe ab Abständen von ca. 1 AU zum Stern in ausreichenden Mengen vorhanden sind. Die präsolare Staubteilchen aus diesem Bereich (\gtrsim 1 AU zum Stern) werden später in die Planetesimale eingeschlossen. Das Verhältnis zwischen den Mengen der untersuchten Staubkomponenten bleibt laut der Rechnung etwa gleich wie im ISM.

3.5 Zusammenfassung

Die in dieser Arbeit durchgeführten Rechnungen von Zerstörungssprozessen der präsolaren Kohlenstoff– und Siliziumkarbidteilchen zeigten keinen wesentlichen Unterschied in den Zerstörungsmechanismen der untersuchten Spezies, der die beobachteten Häufigkeitsverhältnisse in Meteoriten erklären könnte. Beide Komponenten werden instabil, wenn sie in die warmen Bereichen der Akkretionsscheibe eingemischt werden. In inneren Bereichen der Scheibe (≤ 1 AU) ist die Temperatur hoch genug, dass Oxidationsprozesse beginnen und damit die Partikel zerstört werden. Durch die Advektionsströmungen und Diffusion werden die Konzentrationen von den Staubkomponenten in weiter von dem Protostern entfernten Bereichen (bis ca. 10 AU) im Vergleich zur urprünglicher Häufigkeit deutlich verdünnt. Die hier berechneten Kondensationsgrade der beiden Partikelarten haben ähnliche Verläufe. Die präsolaren Siliziumkarbidteilchen zeigen kein stabileres Verhalten unter Bedingungen in der protoplanetaren Scheibe als präsolare Kohlenstoffteilchen.

Aus den Ergebnissen der Rechnungen folgt, dass die häufige Präsenz des präsolaren Siliziumkarbids in Meteoriten nicht alleine an Oxidationsprozessen in der Akkretionsscheibe liegt. Die hier untersuchte Diskrepanz zwischen den Häufigkeiten der präsolaren SiCund Kohlenstoffteilchen kann jedoch auch durch andere Gründe verursacht werden. Zu den Möglichkeiten, die eine größere Häufigkeit von SiC in Meteoriten erklären könnten, zählen folgende Ursachen:

- Die Oxidationsprozesse sind nicht die effektivsten Zerstörungsprozesse in der Scheibe und die Teilchen werden aufgrund anderer Prozesse zestört.
- Die Bildung einer Passivierungsschicht aus Aluminiumoxid kann die Zerstörung von Siliziumkarbid bis zum Erreichen von höheren Temperaturen verzögern. Diese Möglichkeit ist nicht auszuschließen, weil Aluminiumnitrid ein Mischkristall mit SiC bilden kann. In den präsolaren Siliziumkarbidteilchen befindet sich oft ein geringer Anteil (bis 5%) an AlN (Hoppe u. a. 1994). Wenn diese SiC-Teilchen in die warmen Bereiche kommen und zu oxidieren beginnen, wird ihr Al-Anteil in Korund umgewandelt. Wenn die Korundschicht eine merkliche Dicke erreicht, kann sie die SiC-Teilchen vor der weiteren Zerstörung schützen, weil Korund ein thermisch sehr stabiles Material ist. Durch eine Passivierungsschicht aus Korund könnten die SiC-Teilchen bis zu deutlich höheren Temperaturen überleben. Zu Klärung dieser Frage müssten entsprechende Laborexperimente durchgeführt werden.
- Die gemessenen Häufigkeiten von präsolaren Graphitteilchen (Kohlenstoffteilchen) wurden durch die Analyse isotopischer Anomalien von Spurenelementen bestimmt. Die Häufigkeiten dieser Isotope könnten bei den Mischungsprozessen in warmen Bereichen der Scheibe oder im Mutterkörper der Meteoriten bis zur Angleichung an die Isotopenverhältnisse im Sonnensystem modifiziert werden. Die präsolaren Teilchen wären dann auf diese Weise nicht mehr zu identifizieren. Dabei ist Graphit mit seiner porösen Struktur (Bernatowicz u. a. 2006) davon mehr betroffen als Siliziumkarbidteilchen mit ihrer kompakten Kristallstruktur. Möglicherweise ist die Häufigkeit von präsolaren Kohlenstoffpartikeln in Meteoriten größer, als es bis jetzt mit der Isotopenanalyse angenommen wird.

Kapitel 3 Zerstörung präsolarer SiC-Teilchen in protoplanetaren Scheiben

Kapitel 4

Kohlenwasserstoffe

4.1 Einleitung

Kohlenwasserstoffe sind hochmolekulare Verbindungen aus Kohlenstoff und Wasserstoff. Sie sind die Grundbausteine der organischen Chemie und sind damit besonders interessant bei der Frage der Entstehung des Lebens. Moderne Beobachtungsmethoden bringen neue Erkenntnisse über die chemische Zusammensetzung in frühesten Phasen der Planetenentstehung. Komplizierte hochmolekulare Verbindungen beobachtet man im ISM, in Spektren der protoplanetaren Scheiben, in Meteoriten, in Kometenkomae und in Planetenatmosphären.

Im Laufe der Planetenentstehung werden unterschiedliche organische Verbindungen gebildet. Sterne und ihre Akkretionsscheiben entstehen aus dichten Molekülwolken. Die Materie aus den Scheiben wird dann in die Planetesimale und Planeten eingeschlossen. In allen diesen Phasen der Planetenentstehung laufen unterschiedliche chemische Prozesse ab, deren Ergebnis eine Vielfalt organischer Verbindungen sind.

Viele Kohlenwasserstoffe entstehen bereits im interstellaren Medium. Besonders viele organische Verbindungen findet man in den dichten Molekülwolken. Die Produktion von Kohlenwasserstoffen wird sowohl durch Gasreaktionen als auch durch Gas–Festkörperwechselwirkung realisiert. Bei niedrigen Temperaturen und Dichten, die in Molekülwolken herrschen, zählen Ionen–Molekülwechselwirkung und UV–Strahlung zu den wichtigsten und effektivsten Treibern der Reaktionen im ISM. Komplizierte organische Verbindungen entstehen auch durch Reaktionen, die an der mit Eis überzogenen Oberflächen von Teilchen ablaufen (Brown und Charnley 1990). Heutzutage beobachtet man eine große Vielfalt von Kohlenwasserstoffen, die bis zu über 12 Kohlenstoffatome beinhalten. Die nach CO häufigsten kohlenstoffhaltigen Moleküle sind Formaldehyd (H₂CO), Blausäure (HCN) und Propin (CH₃CCH) (Ehrenfreund u. a. 2002). Mit dem Weltraumteleskop Spitzer und mit dem Infrarotsateliten AKARI lassen sich die Emissionsspektren von polyaromatischen Kohlenwasserstoffen (*engl.* PAHs) beobachten (Kaneda u. a. 2011). In der Arbeit von Cernicharo u. a. (2001) wurde über den Nachweis von Benzol (C₆H₆) berichtet. Die chemischen Umwandlungen der Kohlenwasserstoffe sind u. a. in der Arbeit von Bierbaum u. a. (2011) beschrieben.

Dank der neuen Messtechniken ist es auch möglich, Spektren einiger Moleküle in protoplanetaren Scheiben zu beobachten. Die Arbeiten von Dutrey u. a. (1997) und Kastner u. a. (1997) berichteten als erste über die Anwesenheit der einfachen Verbindungen HCN, CN, C_2H , H_2CO und CS in den Akkretionsscheiben um die jungen T–Tauri Sterne. Weitere Arbeiten von Qi u. a. (2003); Semenov u. a. (2005); Dutrey u. a. (2007) konnten weitere Moleküle in jungen zirkumstellaren Objekten nachweisen. Die komplexen chemischen Vorgänge, die bei der Wechselwirkung Gas–Festkörper, bei der Adsorption einiger Moleküle an Teilchen und bei Oberflächenreaktion, die unter ISM–Bedingungen und in äußeren Schichten der protplanetaren Scheiben ablaufen, sind in dem Bericht von Bergin u. a. (2007) zusammengefasst. Das Nachweisen von Kohlenwasserstoffen und organischen Molekülen in protoplanetaren Scheiben ist heutzutage eines der interessantesten Themen (siehe u. a. Oberg u. a. 2011; Carr und Najita 2011).

In den äußeren Bereichen der Scheiben wird die Chemie der Kohlenwasserstoffe genau wie in den Molekülwolken vor allem durch Ionenwechselwirkung, UV-Strahlung und Festkörper-Gas Reaktionen an der Eisoberfläche von Staubteilchen beeinflusst. Die Kometen in unserem Sonnensystem sind vorwiegend aus dem Material gebildet, das ursprünglich in den äußeren Zonen des Sonnennebels war. Daher zeigen die Spektren der Kometenkomae Ähnlichkeit mit den Spektren der interstellaren Molekülwolken (Irvine u. a. 2000). In Kometen wie im ISM beobachtet man eine Vielfalt an Kohlenstoffverbindungen. U. a. sind es H₂CO, CH₃OH, HN-CO, NH₂CHO, HCOOCH₃, CH₄, C₂H₂ und C₂H₆ (Irvine u. a. 2000). Es gibt auch Hinweise auf polyaromatische Kohlenwasserstoffe in den Kometen (Li 2009). Die Verbindungen, die in Kometen zu finden sind, sind nicht ausschließlich das Material, das im ISM oder in äußeren Bereichen der protoplanetaren Scheibe entstanden ist. Außer Kohlenstoffverbindungen und Eis findet man auch kristalline Silikate in Kometen (Wehrstedt und Gail 2002b). Kristalline Silikate entstehen nur in inneren Bereichen von protoplanetaren Scheiben, in denen eine Temperatur von über 800 K herrscht. Das bedeutet, dass die Mischungsprozesse in der Scheibe dazu führten, dass die Verbindungen aus den inneren Bereichen der Scheibe bis zum Entstehungsgebiet der Kometen vordringen konnten. Die Mischungsprozesse auf dieser Skala lassen vermuten, dass die organischen Verbindungen, die in Kometen zu finden sind, zu einem gewissen Teil in inneren Bereichen der Scheibe produziert wurden.

Für die Beobachtung der inneren Zonen der extrasolaren Akkretionsscheiben werden Instrumente mit hoher Winkelauflösung gebraucht. Heutzutage werden organische Verbindungen in protoplanetaren Scheiben mit Hilfe des Spitzer–Raum–Teleskops beobachtet (Lahuis u. a. 2006; Geers u. a. 2006). Das Spitzer–Teleskop lässt es zu, die Bereiche ≤ 13 AU in der Akkretionsscheiben zu analysieren. Ab 2012 wird eine noch bessere Auflösung mit dem Chile–Teleskop ALMA erreicht.

Das Material, das aus dem ISM in eine protoplanetare Scheibe akkretiert, enthält Kohlenstoff zum großen Teil in Form von kleinen Partikeln (Jenkins 2004). Wenn diese Teilchen durch die Mischungsprozesse in der Scheibe nahe zum Protostern gelangen, reagieren sie in der sauerstoffreichen Umgebung mit oxidierenden Molekülen. Wie in Kapitel 3 beschrieben ist, werden die Kohlenstoffteilchen durch die Reaktion mit OH-Radikalen zerstört. Die durch die Reaktion freigesetzten Kohlenstoffatome würden im Fall eines thermodynamischen Gleichgewichts in dem stabilen Gas CO gebunden. Das bedeutet, wenn sich in protoplanetaren Scheiben ein chemisches Gleichgewicht einstellen könnte, dann würde der ganze Kohlenstoff in CO gebunden. Das widerspricht aber den experimentellen Beobachtungen. Die Kohlenstoffchemie läuft also nicht im Gleichgewicht ab. Bei dem Oxidationsvorgang wird eine Reihe der Kohlenwasserstoffverbindungen gebildet (siehe Gail 2002). Diese Kohlenwasserstoffe können in die kalten Bereiche der Scheibe transportiert werden, in denen die sauerstoffhaltigen Moleküle in Eise gebunden werden und die Kohlenwasserstoffe nicht mehr zerstört werden können. Diese Verbindungen können später in die Kometenkörper eingeschlossen werden. Das ist ein möglicher Syntheseweg für Kohlenwasserstoffe in der Akkretionsscheibe. Ein anderer Syntheseweg sind Ionen-Molekülreaktionen bei niedrigen Temperaturen, die durch die kosmische Strahlung und die Röntgenemission des T-Tauri Sterns getrieben werden (Bergin u. a. 2007).

In dieser Arbeit werden Evolutionswege von Kohlenwasserstoffverbindungen in der Gasphase in den inneren Bereichen protoplanetarer Scheiben untersucht. Für die Simulation der komplizierten chemischen Vorgäge mit diesen hochmolekularen Verbindungen werden Methoden der chemischen Kinetik eingesetzt. Dafür werden Datenbanken mit experimentell gemessenen Ratennetzwerken benötigt. In dieser Arbeit werden hierzu Daten aus der Arbeit von Marinov u. a. (1996) verwendet. In dieser Arbeit wird die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen modelliert und ein hierfür geeignetes Ratennetzwerk angegeben, das durch Vergleich mit Labordaten über Verbrennungsprozesse validiert wurde. Dieses Ratennetzwerk enthält alle wichtigen Reaktionen von H, C und O für Spezies mit 1 bis 18 Kohlenstoffatomen. Dieses ist auch geeignet, die Chemie in den wärmeren Zonen (≥ 300 K) der Akretionsscheibe zu studieren. Aus diesen Daten wurde ein xml–Baum erzeugt. Die strukturierten experimentellen Daten werden für die Lösung eines Systems mit 46 Spezies verwendet. Dazu werden 220 Reaktionen bearbeitet und zusammen mit Mischungsvorgängen in der protoplanetaren Scheibe modelliert.

4.2 Chemische Kinetik

Um die Kohlenwasserstoffchemie zu modellieren, müssen die Methoden der chemischen Kinetik verwendet werden. Manche Reaktionen laufen sehr schnell ab. Die Zusammensetzung der Gasphase ändert sich durch solche Reaktionen schnell und strebt einem Gleichgewichtszustand zu. Die permanente Veränderung der Dichten und Temperaturen lassen die langsameren Reaktionen nicht bis zum Ende ablaufen. Eine Einstellung des Gleichgewichts bezüglich langsamen Reaktionen ist unter solchen Bedingungen unwahrscheinlich.

Für die Modellierung der chemischen Zusammensetzung eines Systems, welches nicht im Gleichgewicht ist, ist es notwendig zu wissen, welche Reaktionen bei den vorgegeben Temperaturen und Dichten ablaufen können, und wie schnell sie ablaufen. Dafür werden experimentelle Daten benötigt, die die Reaktionspfade und die Geschwindigkeiten der Reaktionen beinhalten.

Die Daten, die man aus Experimenten für den Ratenkoeffizienten *k* einer chemischen Reaktion erhält, werden in einer Arrheniusform dargestellt:

$$k = A T^{n} \exp\left(-\frac{E_{a}}{R_{g}T}\right).$$
(4.1)

Hierbei ist R_g die universelle Gaskonstante. Der Koeffizient *k* zeigt, mit welcher Geschwindigkeit eine Reaktion bei gegebener Temperatur *T* ablaufen kann. Die Koeffizienten *A*, *n* und E_a sind sogenannte Arrheniuskoeffizienten, die für jede Reaktion experimentell bestimmt werden können. E_a ist die Aktivierungsenergie. Diese muss bei der Reaktion aufgebracht werden, damit die Reaktionspartner reagieren. Die beiden anderen Parameter charakterisieren die Abhängigkeiten der Reaktionsgeschwindigkeit von der Geschwindigkeiten der Reaktionspartner, Einflüsse der Entropie, sowie den Reaktionsquerschnitt.

Mit Hilfe der Arrheniuskoeffizienten können die Produktions– oder Vernichtungsraten für jede Reaktion vom Typ

$$a \mathbf{A} + b \mathbf{B} + \dots \leftrightarrows k \mathbf{K} + l \mathbf{L} \dots$$
 (4.2)

bestimmt werden. Die Produktionsrate für die Spezie A wäre dann

$$R_{\rm A+} = k_{\rm r} n_{\rm K}^k n_{\rm L}^l \cdot \dots . \tag{4.3}$$

Die Zerstörungsrate für die Spezie A ist

$$R_{\rm A-} = k_{\rm v} n_{\rm A}^a n_{\rm B}^b \cdot \dots$$

$$\tag{4.4}$$

Hierbei sind die Größen n_A , n_B , n_K , n_L die Teilchendichten der Spezies A, B, K und L. Die Koeffizienten k_r und k_v sind die Koeffizienten in der Form (4.1). k_r beschreibt die Geschwindigkeit, mit welcher Reaktion (4.2) von rechts nach links (Rückwärtsreaktion) abläuft. k_v steht für die Geschwindigkeit in die andere Richtung (Vorwärtsreaktion). Die zeitliche Veränderung der Konzentration der Spezie A wird als Differenz von Produktions– und Vernichtungsraten bestimmt:

$$\frac{\partial c_{\rm A}}{\partial t} = \frac{R_{\rm A+}}{n} - \frac{R_{\rm A-}}{n}. \tag{4.5}$$
Die zeitliche Veränderung der Konzentrationen, die durch mehrere Reaktionen vom Typ (4.2) beeinflusst werden, wird als Summe der Beiträge aller Reaktionen bestimmt:

$$\frac{\partial c_{\rm A}}{\partial t} = \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Reaktionen}}} \frac{R_{j\,\rm A+}}{n} - \frac{R_{j\,\rm A-}}{n} \,. \tag{4.6}$$

In dieser Form wird die Rate in die Transport–Diffusionsgleichung (1.21) eingesetzt.

4.2.1 xml-Baum

Um einen besseren Überblick über das Reaktionsnetzwerk zu erlangen, wurde ein xml–Baum aus Daten von Marinov u. a. (1996) errichtet. Der xml–Baum beinhaltet alle notwendigen Daten für die Reaktionskinetiksimulationen. In Abbildung 4.1 ist ein kleiner Ausschnitt der xml–Datei gezeigt. Die Datei ist in mehrere Gruppen geteilt: Wasserstoffdissoziation (2 Reaktionen), Deuterium (2 Reaktionen), Wasserstoffchemie und Sauerstoffchemie (20 Reaktionen), Reaktionen mit 1–C–Atom bis Reaktionen mit 18–C–Atomen (660 Reaktionen) und Rußverbrennung (26 Reaktionen).

Alle Reaktionen sind namentlich und in stöchiometrischer Form dargestellt. Für jede Reaktion sind die Arrheniuskoeffizienten aufgelistet. Da manche Koeffizienten in unterschiedlichen Einheiten gegeben sind, wurden diese umgerechnet, so dass sie direkt in die Ratenfunktion (4.1) eingesetzt werden können. Die Originaleinheit wird dann zusätzlich aufgelistet. Manche Ratenkoeffizienten sind in Form

$$k = A \left(\frac{T}{T_0}\right)^n \exp\left(-\frac{E_a}{R_{\rm g}T}\right) \tag{4.7}$$

angegeben. In diesem Fall sollte der Koeffizient $(1/T_0)^n$ vor der Rechnung mit dem Koeffizienten A multipliziert werden, damit der Arrheniusratenkoeffizient in Form

$$k = A T^{n} \exp\left(-\frac{T_{a}}{R_{g}T}\right)$$
(4.8)

verwendet werden kann. Die "Aktivierungtemperatur" ist bereits berechnet und ist im xml-Baum aufgelistet. In der Form (4.8) sind auch die Koeffizienten für die Rückwärtsreaktionen aufgelistet, denn diese Form ist am wenigsten rechenaufwendig. Die Rückwärtskoeffizienten werden aus den thermodynamischen Daten ermittelt.

4.2.2 Rückwärtsreaktionen

Die meisten Reaktionen, die bei Marinov u. a. (1996) aufgelistet sind, können in beiden Richtungen ablaufen. Die Arrheniuskoeffizienten sind aber nicht immer für die Richtung Produkte \rightarrow Edukte (Rückwärtsreaktion) angegeben. In diesem Fall müssen sie aus den Vorwärtskoeffizienten berechnet werden.

```
<?xml version="1.0"?>
<Database>
<!-- Marinov et al. (1996) Combust. Sci. and Tech. 116, 211-287-->
<!-- Ratenkoeffizienten: k = A T^n exp{-E/RT}-->
<!-- Einheiten: Mol, cm^3 , K, cal/mol-->
 <Title name="Hydrogen">
   <Formula name="H"/>
   <Reaction type=" Wasserstoffdissoziation">
     <number name="11a">
     <Source name=" Marinov et al. (1996) Combust. Sci. and Tech. 116,
211-287"/>
       <comment name=" "/>
       H + H + H2 eq H2 + H2
       <Arrhenius>
         <A origin="cm3 Mol(-1)">
           <cm3 value="2.5368e-31"/>
           <cm3Mol value="9.20E+16"/>
         </A>
         <n>-0.600</n>
         <T0>1.0</T0>
         <E origin="calmol(-1)">
           <Jmol value="0"/>
           <calmol value="0.0"/>
           <Ta value="0"/>
         </E>
       </Arrhenius>
     <stoichio>
        H + H + H2 eq H2 + H2
      </stoichio>
      <B_Arrhenius>
        <A unit="cm3">1.37232e-08</A>
        <n>-0.121454</n>
        <Ta>52008.6</Ta>
      </B_Arrhenius>
     </number>
</Reaction>
 </Title>
</Database>
```

Abbildung 4.1: Kleiner Ausschnitt des xml-Baums, in dem alle notwendigen Parameter für die Reaktionskinetiksimulation aufgelistet sind.

Die Arrheniuskoeffizienten für die Rückwärtsreaktionen werden basierend auf dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts berechnet: In einer Reaktion, die sowohl vorwärts als auch rückwärts ablaufen kann, muss ein Gleichgewichtszustand möglich sein. Im Fall eines thermodynamischen Gleichgewichts gilt auch das Massenwirkungsgesetzt. Wenn beide Richtungen einer Reaktion (4.2) im Gleichgewicht sind, gilt

$$k_{\rm v} n_{\rm A}^a n_{\rm B}^b \dots = k_{\rm r} n_{\rm K}^k n_{\rm L}^l \dots$$

$$\tag{4.9}$$

Laut Massenwirkungsgesetztes (1.35) ist die Beziehung zwischen den partiellen Drücken p der jeweiligen Spezies durch

$$p_{\rm K}^k p_{\rm L}^l \dots = p_{\rm A}^a p_{\rm B}^b \dots \exp\left(-\frac{\Delta G}{R_{\rm g}T}\right)$$
(4.10)

festgelegt. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Einheit des Druckes im Massenwirkungsgesetz bar ist. Um diese Drücke in die Teilchendichten umzuwandeln, muss man sie mit einem Konvertierungsfaktor p_c multiplizieren. Wenn bei den Rechnungen das CGS–System angewendet wird, ist der Konvertierungsfaktor $p_c = 10^{-6}$ bar/dyn cm². Dann wird die Beziehung (4.9) zu

$$k_{\rm r} = k_{\rm v} \frac{n_{\rm A}^a n_{\rm B}^b \dots}{n_{\rm K}^k n_{\rm L}^l \dots} = k_{\rm v} (k_{\rm B} T p_{\rm c})^{\Delta \nu} \exp\left(\frac{\Delta G}{R_{\rm g} T}\right). \tag{4.11}$$

Die BOLTZMANNkonstante $k_{\rm B}$ ist hier in CGS–Einheiten ausgedrückt. Hier wird die Beziehung (ideales Gas) $p = n k_{\rm B} T$ angewendet. Die Potenz Δv wird als Differenz zwischen der Anzahl der Edukte und der Anzahl der Produkte

$$\Delta \nu = a + b + \dots - k - l \dots \qquad (4.12)$$

berechnet. Da die Enthalpieänderung ΔG eine komplizierte Funktion der Temperatur ist, verlangsamt sie die Geschwindigkeit der Rechnung. Um die Rechenzeit zu beschleunigen, wird die Gleichung (4.11) in die Form (4.8) gebracht. Die Rückwärtskoeffizienten in Form (4.8) sind im xml–Baum unter dem Tag "B_Arrhenius" eingetragen (siehe Abb. 4.1).

4.3 Numerische Lösungsmethode

Die chemische Entwicklung der Kohlenwasserstoffe in der protplanetaren Scheibe lässt sich mit dem Differenzialgleichungssystem

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_{r,i}\frac{\partial c_i}{\partial r} = \frac{1}{rnh}\frac{\partial}{\partial r}rnhD\frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{R_i}{n}$$
(4.13)

beschreiben. Die Transport–Diffusionsgleichung (4.13) beschreibt die Konzentrationsänderung c_i einer Spezies *i* mit der Zeit *t*. Die Scheibenparameter, wie die radiale Geschwindigkeit v_r , der Diffusionskoeffizient *D* und die Scheibendicke *h*, sind aus dem Scheibenmodell (siehe Kapitel 1) vorgegeben.

Der Ratenterm R_i/n in der Transport–Diffusionsgleichung hat eine nichtlineare Arrheniusform (siehe Gl.(4.6)). Diese sorgt für die Probleme bei der Lösung des Gleichungssystems. Je mehr Moleküle berücksichtigt werden, und dementsprechend je mehr Reaktionen berücksichtigt werden, desto schwieriger und rechenaufwendiger wird die Lösung.

Das System (4.13) gehört zu den parabolischen Differenzialgleichungen. Für die Lösung solcher Systeme wird das Verfahren von Peaceman und Ranchford (in engl. *alternating direction imlicit procedure (ADIP)*) (siehe z. B. Marsal 1976) angewendet. Bei dieser Methode wird das Problem aufgeteilt: In der ersten Hälfte der Zeit werden Zwischenwerte berechnet, die aus der Lösung des nichtlinearen Teils der Gleichung abgeleitet werden. Die weiteren Teile der Differentialgleichung werden in der zweiter Phase des Lösungsverfahrens behandelt.

$$\frac{c_i^* - c_i^{\text{alt}}}{0.5\Delta t} = \frac{R_i^*}{n} \tag{4.14}$$

$$\frac{c_i^{\text{neu}} - c_i^*}{0.5\Delta t} + \left(v_{r,i}\frac{\partial c_i}{\partial r}\right)^{\text{neu}} = \left(\frac{1}{rnh}\frac{\partial}{\partial r}rnhD\frac{\partial c_i}{\partial r}\right)^{\text{neu}}.$$
(4.15)

Bei diesem Lösungsverfahren reagieren die Spezies im ersten halben Schritt ohne Mischung (siehe Gl. (4.14)). Während des nächsten Schritts kommt es zum Materieaustausch, zur Advektion und Diffusion (siehe Gl. (4.15)). Während der Mischungsphase werden die Reaktionsvorgänge der Spezies nicht berücksichtigt.

Reaktionsschritt (Newton-Raphson-Verfahren)

Der Ratenterm in Gl. (4.14) beinhaltet nichtlineare Summanden. Um dieses System zu lösen, muss ein Iterationsverfahren verwendet werden. Das wird mit Hilfe des Newton–Raphson– Verfahrens realisiert. Das Problem wird in diesem Fall zur Suche der Nullstellen reduziert.

Gegeben ist ein System nichtlinearer Gleichungen, dessen Nullstellen gesucht werden:

$$f_i(c_1, c_2, \dots c_N) = \frac{c_i^{\text{new}} - c_i^{\text{old}}}{0.5\Delta t'} - \frac{R_i^{\text{new}}}{n} = 0.$$
(4.16)

Die Werte "new" und "old" liegen im Zeitintervall $[t_{alt}, t_*]$ (siehe Gl. (4.14)) und bezeichnen die Newtonschritte $\Delta t'^1$. Die Taylorentwiklung der Funktion f_i ist

$$f_i(\mathbf{c} + \delta \mathbf{c}) = f_i(\mathbf{c}) + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{\partial f_i}{\partial c_j} \delta \mathbf{c} + O(\delta \mathbf{c}^2).$$
(4.17)

¹Die Zeitpunkte t_{new} und t_{old} unterscheiden sich von den Werten t_{alt} und t_* . In einem Zeitintevall $[t_{alt}, t_*]$ werden mehrere Newtonschritte $\Delta t'$ gemacht.

Hierbei ist **c** die vektorielle Darstellung der Konzentrationen $c_1, c_2 \dots c_N$. Und die Änderung der Konzentration δ **c** wird als

$$\mathbf{c}^{\text{new}} = \mathbf{c}^{\text{old}} + \delta \mathbf{c} \tag{4.18}$$

definiert. Die Taylorreihe (4.17) lässt sich auch mit Hilfe der Jacobimatrix schreiben. Die Jacobimatrix ist als

$$J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial c_j}.\tag{4.19}$$

definiert. Dann gilt

$$\mathbf{f}(\mathbf{c} + \delta \mathbf{c}) = \mathbf{f}(\mathbf{c}) + \mathbf{J}\delta \mathbf{c} + O(\delta \mathbf{c}^2).$$
(4.20)

Wenn alle Terme der Größenordnung $\delta \mathbf{c}^2$ und höher vernachlässigt werden und die Funktion $\mathbf{f}(\mathbf{c} + \delta \mathbf{c}) = 0$ gesetzt wird, dann resultiert ein System linearer Gleichungen. Die Lösung dieses Systems bestimmt den Wert und die Richtung des Schrittes $\delta \mathbf{c}$, welcher die Funktion näher zu einer Nullstelle bringt. Das System der Gleichungen ist

$$-\mathbf{f} = \mathbf{J}\delta\mathbf{c} \,. \tag{4.21}$$

Bei jedem neuen Schritt $\delta \mathbf{c}$ wird gerprüft, ob die Funktion konvergiert. Gute Lösungsalgorithmen, die auf dem Newton–Raphson–Verfahren basieren, sind in Press u. a. (1992) ausführlich beschrieben.

Advektions- und Diffusionsterme

Bei der Behandlung des Advektions–Diffusionsschrittes entsteht ein tridiagonales Gleichungssystem (siehe Gl. (4.15)):

$$\frac{c_{i,k}^{\text{neu}} - c_{i,k}^{*}}{0.5\Delta t} + \text{Advection} = \frac{1}{r_{k}n_{k}^{\text{neu}}h_{k}^{\text{neu}}} \frac{(n\,h\,D)_{k+0.5}^{\text{neu}} \frac{c_{i,k-1}^{\text{neu}} - c_{i,k}^{\text{neu}}}{r_{k+1} - r_{k}} - (n\,h\,D)_{k-0.5}^{\text{neu}} \frac{c_{i,k-1}^{\text{neu}} - c_{i,k-1}^{\text{neu}}}{0.5\,(r_{k+1} - r_{k-1})} \,.$$
(4.22)

Im Fall eines stationären Modells bleiben die Teilchendichte *n*, die Scheibendicke *h* und der Diffusionskoeffizient *D* unverändert mit der Zeit. Die Diskretisierung des Advektionsterms (sog. "up–stream" Diskretesierung) hängt von der Richtung der Geschwindigkeit ab:

Advektion =
$$\begin{cases} v_{r,i,k} \frac{c_{i,k+1} - c_{i,k}}{r_{k+1} - r_{k}}, & \text{wenn } v_{r,i,k} \le 0, \\ v_{r,i,k} \frac{c_{i,k} - c_{i,k-1}}{r_{k} - r_{k-1}}, & \text{wenn } v_{r,i,k} > 0. \end{cases}$$
(4.23)

Die Koeffizienten $(n h D)_{k+0.5}$ und $(n h D)_{k-0.5}$ werden aus

$$(n h D)_{k+0.5} = 0.5 (n_{k+1} h_{k+1} D_{k+1} + n_k h_k D_k)$$
(4.24)

$$(n h D)_{k-0.5} = 0.5 (n_k h_k D_k + n_{k-1} h_{k-1} D_{k-1})$$
(4.25)

bestimmt.

Beide Schritte in Gln. (4.14)-(4.15) werden in Form linearer Gleichungen dargestellt. Die erhaltenen Systeme werden in dieser Arbeit mit Hilfe des direkten Lösers PARDISO (Schenk und Gärtner 2004, 2006; Schenk u. a. 2008) gelöst.

Zeitschritt

Bei der Lösung des Reaktionsschrittes in Gl. (4.14) ist zu beachten, dass manche Reaktionen innerhalb von wenigen Bruchteilen einer Sekunde ablaufen. Besonders in Bereichen, in denen die Temperatur hoch ist, werden die Zeitschritte extrem klein.

Um die Simulation zu beschleunigen, werden die Zeitschritte für jeden Gitterplatz einzeln bestimmt. Für jeden Gitterplatz wird ein voller Chemieschritt Δt gemacht. Dieser Schritt wird in kleine Zwischenschritte unterteilt. Die kleinen Zwischenschritte werden so gewählt, dass die maximale Änderung der Konzentrationen ca. 3% beträgt. In inneren Bereichen werden mehrere Zwischenschritte gemacht, die zum Teil kleiner als 10^{-7} s werden, in äußeren wird der ganze Schritt Δt gemacht. Die schematische Darstellung der Zeitschrittverteilung inner-



Abbildung 4.2: Die schematische Dartellung der Zeitschrittverteilung. In inneren Bereichen der protoplanetaren Scheibe herrschen hohe Temperaturen und Reaktionen laufen schnell ab. Daher wird der Zeitschritt in den inneren Bereichen sehr klein. In äußeren Bereichen ist die Temperatur niedrig und der Zeitschritt wird von der Advektion bestimmt. Die Zeitschritte werden so gewählt, dass die Änderung der Konzentration in diesem Zeitraum ca. 3% beträgt.

halb der Scheibe ist in Abb. (4.2) dargestellt.

Die Größe der Zwischenschritte bleibt innerhalb der Simulationszeit nicht konstant. In den ersten Sekunden sind die Zeitschritte am kleinsten. Mit der Zeit werden die Konzentrationsänderungen kleiner und die Zeitschritte größer. Wichtig ist, die Zeitschritte nicht zu schnell hochzusetzen, um numerische Instabilitäten zu vermeiden.

4.3.1 Rußverbrennung

Wie schon in Kapitel 3 beschrieben wurde, werden Kohlenstoffteilchen bei einer Reaktion mit OH–Radikalen zerstört:

$$\operatorname{Ru}_{N+2} + \operatorname{OH} \to \operatorname{Ru}_N + \operatorname{HCCO}.$$
 (4.26)

Hierbei wird mit "Ruß" eine amorphe Struktur bezeichnet, welche aus komplex angeordneten aromatischen Kohlenstoffsechsringen besteht. Mit N ist hierbei die Anzahl der Kohlenstoffatome in einem Rußpartikel bezeichnet.

In Kapitel 3 wurden bei der Simulation des Zerstörungsvorganges mehrere Teilchenradiusintervalle eingeführt und ihre Zeitentwicklung beobachtet. Um den Rechenaufwand zu minimieren, wird hier nur eine Teilchengröße *a* behandelt. Hierzu wird eine Modellstaubsorte eingeführt, die alle ursprünglichen Rußpartikel repräsentiert, die aus dem ISM in die protoplanetare Scheibe kommen. Diese Modellstaubstorte kann schematisch mit "C₂" bezeichnet werden. Die Reaktion mit dem OH wird in diesem Fall zu

$$C_2 + OH \rightarrow HCCO$$
 (4.27)

reduziert. Der Ratenterm der Kohlestoffzerstörung wird durch

$$R = 0.5 n_{\rm OH} \frac{4\pi a^2}{N_{\rm C}} n_{\rm C_2} \,\alpha_{\rm ox} v_{\rm th} \tag{4.28}$$

bestimmt. Da die Modellstaubsorte zwei Kohlenstoffatome besitzt, steht der Faktor 0.5 in dem Ratenterm. n_{OH} ist die Teilchendichte der OH–Radikale. Die Oberfläche des Teilchens $4\pi a^2/N_{C}$ charakterisiert den durchschnittlichen Reaktionsquerschnitt pro C-Atom. Die Teilchendichte der Kohlenstoffpartikel ist mit n_{C_2} bezeichnet. v_{th} steht für die thermische Geschwindigkeit der OH–Moleküle.

In Gl. (4.28) ist der Radius des Modellteilchens unbekannt. Dieser muss abgeschätzt werden. Das Volumen einer Formeleinheit der Staubpartikel ist durch

$$V_{\rm C} = \frac{A m_{\rm H}}{\rho_{\rm C}} \tag{4.29}$$

gegeben. Hierbei ist A = 12 die Massenzahl von Kohlenstoff. $m_{\rm H}$ ist die Masse des Wasserstoffatoms. Das Volumen ist demnach $V_{\rm C} = 8.8813 \cdot 10^{-24}$ cm³. Die Teilchendichte der Kohlenstoffatome in einem Modellpartikel ist dann

$$N_{\rm C} = \frac{4\pi a^3/3}{V_{\rm C}} \,. \tag{4.30}$$

Die Teilchendichte der Kohlenstoffatome $n_{\rm C}$ in den Molekülwolken wird dann durch

$$n_{\rm C} = \epsilon_{\rm KT} N_H \frac{4\pi}{3} \frac{a^3}{V_{\rm C}} \tag{4.31}$$

bestimmt. Hierbei ist ϵ_{KT} die Dichte der Kohlenstoffpartikel pro Wasserstoffatom. Ihr Wert beträgt ca. 10⁻¹¹ in den Molekülwolken (Zubko u. a. 2004). N_H ist die Teilchendichte der Wasserstoffatome. Die Konzentration der Kohlenstoffatome pro Wasserstoffkern ist

$$c_{\rm C} = \epsilon_{\rm KT} \frac{4\pi}{3} \frac{a^3}{V_{\rm C}} = 0.6 \epsilon_{\rm C} \,.$$
 (4.32)

Der Faktor 0.6 bedeutet, dass etwa 60% des ganzen Kohlenstoffs in dem ISM in Staubform vorhanden ist (Mathis u. a. 1977; Zubko u. a. 2004). Die Häufigkeit von Kohlenstoff in dem ISM ist $\epsilon_{\rm C} = 3.55 \cdot 10^{-4}$. Daraus lässt sich der Radius *a* ermitteln:

$$a = \left(\frac{0.9 \epsilon_{\rm C} V_{\rm C}}{2\pi \epsilon_{\rm KT}}\right)^{\frac{1}{3}} = 3.5611 \cdot 10^{-6} \,\rm{cm}\,. \tag{4.33}$$

Die Rate aus Gl. (4.28) wird zu

$$R = 3.7277 \cdot 10^{-16} n_{\rm OH} n_{\rm C_2} \sqrt{T} .$$
(4.34)

Diese Rate beschreibt die Zunahme von HCCO und die Abnahme von OH.

4.4 Ergebnisse

4.4.1 Wasserstoffdissoziation

Um das Programm zu testen, werden zunächst zwei einfache Systeme simuliert. Zu den Testsystemen gehören in dieser Arbeit ein System aus Wasserstoff und ein System mit Wasserstoff– Sauerstoffzusammensetzung. In den beiden Systemen wird ein Gleichgewichtszustand als Ergebnis erwartet.

Zunächst wird die Entwicklung der Wasserstoffspezies in protoplanetaren Scheiben simuliert. Hierzu wird die Anfangszusammensetzung so gewählt, dass der ganze Wasserstoff in Form von molekularem Wasserstoff vorkommt. Der atomare Wasserstoff sollte in diesem Fall als Ergebnis der Wasserstoffdissoziation entstehen.

In Abb. 4.3 sind die Ergebnisse der Rechnung präsentiert. Die beiden Spezies haben wie erwartet die Gleichgewichtskonfiguration erreicht (vergl. Abb. 3.2). Die Summe der Konzentrationen $c_{\rm H} + 2c_{\rm H_2}$ ergibt mit guter Genauigkeit eins. Das Ergebnis der Rechnung ist in Abb. 4.3 dargestellt. In warmen Bereichen der Scheibe beginnt Wasserstoff zu dissoziieren. Als Folge ist der Wasserstoff bis zum Abstand von 0.7 AU zum Teil in atomarer Form vorhanden. Die Temperaturen sind jedoch nicht so hoch, um den Wasserstoff vollständig zu dissoziieren. Der Gleichgewichtzustand (wie in Abb. 4.3 zu sehen ist) wird bereits innerhalb der ersten 1000 s erreicht.



Abbildung 4.3: Die Konzentrationen des molekularen und des atomaren Wasserstoffs in der protoplanetaren Scheibe nach dem Einstellen des Gleichgewichts.



Abbildung 4.4: Die Konzentrationen der wasserstoff– und sauerstoffhaltigen Moleküle in der protoplanetaren Scheibe nach dem Einstellen des Gleichgewichts.

4.4.2 Wasserstoff- und Sauerstoffchemie

In der zweiten Testrechnung wird die Zusammensetzung einer Gasphase simuliert, die aus wasserstoff- und sauerstoffhaltigen Molekülen besteht. In der Simulation sind OH, H₂, H, H₂O, O, O₂, HO₂ und H₂O₂ berücksichtigt. In dem Reaktionsnetztwerk von Marinov u. a. (1996) sind für diese Komponenten 22 Reaktionen aufgelistet. Diese werden in der Rechnung berücksichtigt.

Die Ergebnisse der Simulation sind in Abb. 4.4 dargestellt. Die Gleichgewichtkomposition in dieser Rechnung ist sehr ähnlich wie die in Abb. 3.2. Die Zusammensetzung, die mit Reaktionskinetik bestimmt wurde, beinhaltet auch die Komponenten HO₂ und H₂O₂, welche sehr kleine Konzentrationen von weniger als 10^{-14} haben. Aus diesen Grund werden diese Gaskomponenten bei den Rechnungen im thermodynamischen Gleichgewicht (Gasmischung in Abb. 4.4) nicht berücksichtigt. Die Gaskomponenten OH, H, O, O₂, HO₂ und H₂O₂ spiegeln den Temperaturverlauf in der Scheibe wider.

Die beiden Testsysteme zeigen vernünftige Ergebnisse. Die Rechnungen haben erwiesen, dass die Konfiguration, die mit Reaktionskinetik gerechnet wurde, die Ergebnisse reproduziert, die im Gleichgewicht erhalten wurden. Damit zeigt sich das Lösungsverfahren als glaubwürdig.

4.4.3 Kohlenwasserstoffchemie

In diesem Abschnitt wird die Gasphasenchemie der Kohlenwasserstoffverbindungen modelliert, die nicht mehr als 4 Kohlenstoffatome beinhalten. Das System besteht aus 45 Gasspezies: OH , HCCO, CH₃, H₂, C₂H₆, H, CH₄, H₂O, O, HO₂, H₂O₂, CH₃O, O₂, CH₂O, Methylradikal CH₂[s] ("s" steht für singlet), CH₂, HCOH, CH, CH₃OH, CH₂OH, HCO, CO₂, CO, C₂H₄, C₂H₂, C₂H₃, H₂CCCH, C₂H₅, Alyllradikal C₃H₅[a], CH₂CO, C, C₃H₂, C₂H, CH₂HCO, C₃H₆, CH₂CHCCH, CH₂CHCHCH₂, CH₂CHCCH₂, HCCOH, CH₃HCO, CH₃CO, CHOCHO, C₂, C₄H₂ und C₂O. Für diese Zusammensetzung werden in der Simulation 220 Reaktionen berücksichtigt.

Beitrag der CO–Chemie

Zunächst wird der Ablauf der Chemie für die reine Gasphasenzusammensetzung modelliert. Die Kohlenstoffpartikel sind bei dieser Simulation nicht berücksichtigt.

Die Rechnung wird mit der Gleichgewichtszusammensetzung der häufigsten Spezies OH, H₂, H, H₂O und CO gestartet. Die Anfangsgasmischung ist in Abb. 4.5 dargestellt. Bei dieser Mischung ist Wasserstoff stark im Überschuss gegenüber O und C vrohanden. Rußpartikel beinhalten etwa 60% des gesamten Kohlenstoffs. Das bedeutet, dass nur etwa 40% des Koh-



Abbildung 4.5: *Die Konzentrationen der ursprünglichen Gasmischung in der protoplanetaren Scheibe vor dem Start der Simulation.*



Abbildung 4.6: *Die Konzentrationen der Molekülverbindungen mit einem C–Atom in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 1.5 Tage).*



Abbildung 4.7: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 1.5 Tage).



Abbildung 4.8: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 53 Tage).



Abbildung 4.9: *Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 53 Tage).*

lenstoffs in dieser Rechnung berücksichtigt ist. Der Überschuss von Wasserstoff relativ zum Kohlenstoff fördert die Bildung von Kohlenwasserstoffen.

In den Abbildungen 4.6-4.7 sind die Änderungen der Zusammensetzung in den ersten simulierten 1.5 Tagen dargestellt. Die Abbildungen zeigen die häufigsten Kohlenwasserstoffe, die während dieser Simulationszeit gebildet werden. Innerhalb dieser kurzen Zeit ist der Mischungseinfluss gering. Die chemischen Vorgänge sind dagegen gut zu erkennen. In den inneren Zonen der Scheibe entstehen erste einfache Kohlenwasserstoffe. Besonders häufig sind die Verbindungen mit einem C–Atom wie CH₄, CH₃, CH₂ (siehe Abb. 4.6) und einige Verbindungen mit Sauerstoff wie HCO, CH₂O (siehe Abb. 4.7 oben). Die stabilsten Verbindungen CO und CO₂ sind die häufigsten Kohlenstoffverbindungen.

Die Verbindungen, die zwei und mehr C-Atome beinhalten, werden zu dieser Zeit nur in kleinen Mengen gebildet (siehe Abb. 4.7 unteres Bild). Allerdings ist zu erkennen, dass C_2H_2 eine Tendenz zu größeren Konzentrationen zeigt. Zur Simulationszeit von ca. 53 Tagen werden diese Moleküle effektiv produziert (siehe Abb. 4.8).

Die Abbildungen 4.8 zeigen die Konzentrationen einiger der häufigsten Kohlenwasserstoffe zum Zeitpunkt von 53 Tagen. Besonders effektiv werden Kohlenwasserstoffe im Bereich zwischen 0.5 und 0.6 AU produziert. In diesem Bereich beginnt die Bildung der höheren Kohlenwasserstoffe wie C_2H_3 , CH_2CO , HCCOH, CHOCHO und C_4H_2 . Die Konzentrationen dieser Verbindungen bleiben aber jedoch gering. Die Konzentrationen von C_2H_2 und C_2H_4 sind zu diesem Zeitpunkt bereits relativ hoch.

Auch die Verbindungen mit einem C–Atom werden im Bereich 0.5 - 0.6 merklich verändert (siehe 4.9). Offensichtlich werden in diesem Bereich die Verbindungen CH_n und C₂H_n effektiv produziert. Weitere Verbindungen werden vor allem durch die Reaktionen mit H₂, O und OH gebildet.

Das Ergebnis in diesem Abschnitt charakterisiert nicht genau den Beitrag von CO zur Wasserstoffchemie in der Gasphase. In der hier durchgeführten Rechnung besteht ein starker Wasserstoffüberschuss, der zu einer effektiven Produktion der Kohlenwasserstoffe führt. Es ist zu sehen, dass der Beitrag von CO zur Kohlenwasserstoffchemie in den protoplanetaren Scheiben nicht vernachlässigbar klein ist.

Gaschemie mit Rußverbrennung

In diesem Abschnitt wird die chemische Entwicklung einer Gasmischung mit Rußpartikeln betrachtet. Die Simulation wird mit der Gleichgewichtszusammensetzung gestartet, die in Abbildung 4.10 präsentiert ist. Das Gasgemisch besteht aus OH, H₂, H, H₂O und CO. Hierzu kommen noch Rußpartikel, die am Rand der Scheibe mit interstellarer Häufigkeit vorkommen. Die Konzentration der Modellrußpartikel c_{C_2} im Abstand von 100 AU zum Protostern



Abbildung 4.10: *Die Konzentrationen der ursprünglichen Gasmischung mit Rußpatikel in der protoplanetaren Scheibe vor dem Start der Simulation.*



Abbildung 4.11: *Die Konzentrationen der Molekülverbindungen mit einem C–Atom in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 1.5 Tage).*

beträgt $0.3\epsilon_{\rm C}$. Der Vorfaktor 0.3 bedeutet, dass insgesammt 60% des Kohlenstoffstaubs in kondensierter Form vorkommt. Im inneren Bereich sind alle Kohlenstoffpartikel verbrannt. Aus früheren Rechnungen (siehe Kapitel 3) ist bekannt, dass Kohlenstoff ab Temperaturen von etwa 1 200 K nicht mehr vorhanden ist.

Die Anwesenheit der Kohlenstoffpartikel beeinflusst die Zusammensetzung der Gasphase in der Scheibe wesentlich. Wie im vorherigen Abschnitt werden die Zusammensetzungen der Gasphase in den ersten 1.5 Tagen diskutiert. Die Abbildungen 4.11-4.12 zeigen die häufigsten Gaskomponenten, die während der ersten 1.5 Tage gebildet wurden. In Abb. 4.11 ist zu sehen, dass bereits in dieser kurzen Zeit die Konzentrationen der Verbindungen mit einem C–Atom im Bereich der Kohlenstoffverbrennung (bei etwa 0.5 AU) deutlich erhöht werden. Die Konzentrationen dieser Verbindungen werden sogar höher als die Konzentration der OH–Radikale in diesem Bereich (vergl. Abb. 4.10).

Durch die Reaktion der Rußpartikel mit OH–Radikalen wird HCCO in die Gasphase freigesetzt. HCCO reagiert mit atomarem Wasserstoff, was zur Produktion von CH₂ und CO führt. Aus diesen Verbindungen entstehen weitere Kohlenwaserstoffe (siehe Gail 2002).

Die Rußverbrennung führt dazu, dass die Konzentrationen der C_2H_2 und C_2H_4 schon zu dieser Zeit relativ hoch sind.

Zum Zeitpunkt von 53 Tage steigen die Konzentrationen der Kohlenstoffverbindungen im Bereich von 0.5-0.6 AU (siehe Abb. 4.13-4.14). In Abbildungen sind zwei lokale Maxima im Bereich von 0.5-0.7 AU zu erkennen. Das erste Maximum befindet sich im Abstand 0.5-0.6 AU vom Protostern. Dieses wird von der CO–Gaschemie verursacht (siehe Abschnitt oben). Das zweite Maximum kommt durch die Rußverbrennung. Dieses lokale Maximum befindet sich etwas näher zu 0.7 AU. Die HCCO–Konzentration ist in der Rechnung mit Rußpartikel deutlich höher als ohne. Dadurch werden die weiteren Kohlenstoffverbindungen von Typ CH_n im Bereich von ca. 0.6 AU effektiver produziert (vergl. Abb. 4.13 und Abb. 4.9).

Der Beitrag der CO–Chemie zu höheren Kohlenwasserstoffen von Typ C_2H_n und weiteren Kohlenwasserstoffen bleibt an diesem Punkt höher als der Beitrag der Rußverbrennung (vergl. Abb. 4.14 und Abb. 4.8). Allerdings wird das Entstehungsgebiet dieser Verbindungen durch die Rußverbrennung bis 0.7 AU ausgedehnt.

Die hier gezeigten Konzentrationsprofile ähneln denen, die in der Arbeit von Gail (2002) ohne Berücksichtigung der Diffusion simuliert sind. Die Kurven haben einen etwas steilen Verlauf. Das liegt daran, dass die Rußpartikelkonzentration abrupt im Bereich von ca. 0.5 AU auf null geht (siehe Abb. 4.10). Die hier gewählten Anfangsbedingungen simulieren den Zustand, bei dem die Kohlenstoffpartikel in warmen Bereichen bereits oxidiert sind. Die Ergebnisse dieser Simulation zeigen daher nur die Kohlenwasserstoffe, die durch die Verdampfung der aus dem ISM frisch eingemischten Rußpartikel und durch CO–Chemie gebildet wurden. In den Abbildungen ist zu erkennen, dass Kohlenwasserstoffe sogar bei diesen Anfangsbe-



Abbildung 4.12: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 1.5 Tage).



Abbildung 4.13: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 53 Tage).



Abbildung 4.14: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 53 Tage).

dingungen bereits in den ersten Simulationstagen effektiv produziert werden können.

Gaschemie mit Rußverbrennung (Neue Anfangsbedingungen)

Um den kompletten Beitrag der Kohlenstoffpartikel zur Kohlenwasserstoffchemie abzuschätzen, wird die Simulation mit neuen Anfangsbedingungen gestartet. Die neue Anfangszusammensetzung ist in Abbildung 4.15 dargestellt. In diesem Fall hat die Konzentration der Kohlenstoffpartikel bis in innere Bereiche einen Wert von $0.5(\epsilon_C - c_{CO})$. Diese Anfangsbedingung ermöglicht es, dass die Produkte der Rußverbrennung bereits in den ersten modellierten Tagen entstehen können.



Abbildung 4.15: Die Konzentrationen der ursprünglichen Gasmischung mit Rußpatikeln in der protoplanetaren Scheibe vor dem Start der Simulation.

Wenn die Rußpartikel von Anfang an mit hoher Häufigkeit vetreten sind, werden die Produkte ihrer Verbrennung deutlich häufiger vertreten sein als bei der vorherigen Anfangsbedingung. In den Abb. 4.16-4.17 sind die Ergebnisse der ersten simulierten 2.3 Tage dargestellt. In den Abbildungen ist zu erkennen, dass die Konzentrationen der meisten Kohlenwasserstoffe deutlich größer sind als bei der vorherigen Simulation. Die Konzentration von CH₄ erreicht Werte bis 10^{-6} . Die Konzentrationen der Verbindungen CH₃ und CH₄ bleiben bis zu einem Abstand von 0.5 AU hoch.



Abbildung 4.16: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 2.3 Tage). Die obere Linie zeigt die Konzentration der Rußpartikel, welche im inneren Bereich deutlich abgenommen hat.



Abbildung 4.17: Die Konzentrationen der Molekülverbindungen in der protoplanetaren Scheibe (Simulationszeit 2.3 Tage).

Das direkte Verbrennungsprodukt HCCO hat höhere Konzentration in inneren Zonen der Scheibe, es hat aber immer noch eine geringe Häufigkeit, weil HCCO direkt in CH_2 umgewandelt wird. Die höheren Kohlenwasserstoffe mit zwei C-Atomen und mehr werden im Bereich der Rußverbrennung effektiver produziert. Nur die Konzentrationen von C_2H_2 und C_2H_4 haben hohe Konzentrationen. Die Konzentrationen der weiteren Verbindungen bleiben dagegen niedrig. Charakteristisch ist die Breite der Konzentrationsprofile. Die Produktion der Kohlenwasserstoffe findet im ganzen Bereich der Rußverbrennung statt. Wenn die Konzentration der Kohlenstoffpartikel durch die Verdampfung kleiner wird, werden die Kohlenwasserstoffe vorwiegend, wie bei der Rechnung oben, im Bereich von 0.5-0.7 AU gebildet.

4.5 Zusammenfassung

In der Arbeit wurde die chemische Entwicklung von 45 Gasspezies, darunter auch 37 einfache Kohlenstoffverbindungen, unter Bedingungen einer protoplanetaren Scheibe simuliert. Aus den Rechnungen folgt, dass einfache Kohlenwasserstoffe in inneren Bereichen der Scheibe produziert werden können.

In der Arbeit wurden drei Systeme mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen modelliert. In einem System wurde die Chemie der CO–Moleküle untersucht. Aus den Rechnungen folgt, dass der Beitrag der Gaschemie zur Bildung der Kohlenwasserstoffe in inneren Zonen der protoplanetaren Scheiben nicht vernachlässigbar klein ist.

Der größte Teil der Kohlenwassertsoffverbindungen wird durch die Verdampfung von Kohlenstoffpartikeln produziert. Das ist in dem Modell mit der zweiten und dritten Anfangszusammensetzung zu erkennen. Obwohl die Anfangsbedingungen bei der zweiten Anfangszusammensetzung so gewählt sind, dass nur ein kleiner Teil der Rußpartikel in Kontakt mit den OH–Radikalen kommt, wird der Beitrag der Kohlenstoffpartikel zur Entstehung der Kohlenwasserstoffe von Typ CH_n größer als der Beitrag der CO–Chemie. Mit zunehmender Zeit wird der Einfluss der Kohlenstoffpartikel größer.

Bei der dritten Zusammensetzung werden die meisten Kohlenstoffverbindungen gebildet. Die Verbrennung der Rußpartikel spielt die entscheidende Rolle bei der Entstehung der Kohlenwasserstoffe in inneren Bereichen der Scheibe.

Die Konzentrationsprofile, die nach 53 Tagen der Simulationszeit entstanden sind, ähneln den Ergebnissen aus der Arbeit von Gail (2002) ohne Berücksichtigung der Diffusionsprozesse. In der Rechnung von Gail (2002) wurde gezeigt, dass die Verbindungen, die in inneren Bereichen gebildeten wurden, weit vom Stern entfernte Gebiete erreichen und somit zum Teil zur Zusammensetzung der Kometen beitragen. In dieser Arbeit wurden deutlich mehr Kohlenstoffverbindungen in den Simulationen berücksichtigt. Aus Zeitgründen konnten in der Simulationen die Langzeitentwicklung nicht weiterverfolgt werden. Die Mischungsverhältnisse

im Scheibenmodell begünstigen die Verbreitung der in inneren Bereichen produzierten Spezies innerhalb der Scheibe. Die Verbindungen, die in inneren Bereichen der Scheibe gebildet werden, werden zum Teil in die äusseren Zonen der Scheibe transportiert und liefern damit einen Beitrag für u. a. Kometen und weitere Körper, die aus dem Material gebildet werden.

4.6 Ausblick

Das in der Arbeit entwickelte Programm lässt Reaktionskinetikrechnungen zusammen mit Mischungsprozessen in der Scheibe simulieren. Mit dem Programm können weitere chemische Entwicklungen der Kohlenwasserstoffverbindungen in protoplanetaren Scheiben verfolgt werden. Im Programm können weitere Verbindungen aus der Marinov–Datenbank bzw. aus weiteren Datenbanken mit thermodynamischen Daten in Arrheniusform verwendet werden. Darüber hinaus könnte das Programm auch Simulationen mit Ionenchemie durchführen. Damit könnte eine Verbidnung zwischen der Chemie in inneren Bereichen der Scheibe und in äusseren Schichten der Scheibe, die in expoplanetaren Objekten beobachtet werden können, realisiert werden. Rechnungen zur Langzeitentwicklung der Kohlenwasserstoffe können zudem Informationen über Verbindungen liefern, die in weit vom Stern entfernte Gebiete transportiert werden und später in Kometen eingeschlossen werden.

Kapitel 4 Kohlenwasserstoffe

Literaturverzeichnis

- [Brearley und Jones 1998] BREARLEY, A. J.; JONES, R. H.: Chondritic meteorites . In: *Rev. Mineralogy* 36 (1998), S. 3.1–3.398
- [Alexander 2009] ALEXANDER, C. M. D.: Laboratory studies of circumstellar and interstellar materials. S. 75–102. In: BOULANGER, F. (Hrsg.); JOBLIN, C. (Hrsg.); JONES, A. (Hrsg.); MADDEN, S. (Hrsg.): Interstellar Dust from Astronomical Observations to Fundamental Studies, EDP sciences, 2009
- [Amelin u. a. 2002] AMELIN, Y.; KROT, A. N.; HUTCHEON, I. D.; ULYANOV, A. A.: Lead Isotopic Ages of Chondrules and Calcium-Aluminum-Rich Inclusions. In: *Science* 297 (2002), September, S. 1678–1683
- [Barin 1995] BARIN, I.: *Thermodynamical Data of Pure Substances*. Weinheim : VCH, 1995
- [Bergin u. a. 2007] BERGIN, E. A.; AIKAWA, Y.; BLAKE, G. A.; VAN DISHOECK, E. F.: The Chemical Evolution of Protoplanetary Disks. In: *Protostars and Planets V* (2007), S. 751– 766
- [Bernatowicz u. a. 2006] BERNATOWICZ, T. J.; CROAT, T. K.; DAULTON, T. L.: Origin and Evolution of Carbonaceous Presolar Grains in Stellar Environments. S. 109–126. In: LAURETTA, D. S. AND MCSWEEN, H. Y. (Hrsg.): Meteorites and the Early Solar System II, 2006
- [Bierbaum u. a. 2011] BIERBAUM, V. M. ; LE PAGE, V. ; SNOW, T. P.: PAHs and the Chemistry of the ISM. In: *EAS Publications Series* Bd. 46, März 2011, S. 427–440
- [Blander und Fuchs 1975] BLANDER, M.; FUCHS, L. H.: Calcium-aluminum-rich inclusions in the Allende meteorite - Evidence for a liquid origin. In: *Geochim. Cosmochim. Act.* 39 (1975), Dezember, S. 1605–1619
- [Brown und Charnley 1990] BROWN, P. D. ; CHARNLEY, S. B.: Chemical models of interstellar gas-grain processes. I - Modelling and the effect of accretion on gas abundances and mantle composition in dense clouds. In: *Monthly Notices R. Astron. Soc.* 244 (1990), Juni, S. 432–443

- [Carr und Najita 2011] CARR, J. S.; NAJITA, J. R.: Organic Molecules and Water in the Inner Disks of T Tauri Stars. In: ArXiv e-prints (2011), April
- [Cernicharo u. a. 2001] CERNICHARO, J.; HERAS, A. M.; TIELENS, A. G. G. M.; PARDO, J. R.; HERPIN, F.; GUÉLIN, M.; WATERS, L. B. F. M.: Infrared Space Observatory's Discovery of C₄H₂, C₆H₂, and Benzene in CRL 618. In: *ApJ* 546 (2001), Januar, S. L123–L126
- [Clayton u. a. 1977] CLAYTON, R. N.; ONUMA, N.; GROSSMAN, L.; MAYEDA, T. K.: Distribution of the pre-solar component in Allende and other carbonaceous chondrites. In: *Earth* and Planetary Science Letters 34 (1977), März, S. 209–224
- [Daulton u. a. 2003] DAULTON, T. L. ; BERNATOWICZ, T. J. ; LEWIS, R. S. ; MESSENGER, S. ; STADERMANN, F. J. ; AMARI, S.: Polytype distribution of circumstellar silicon carbide: Microstructural characterization by transmission electron microscopy. In: *Geochim. Cosmochim. Act.* 67 (2003), S. 4743–4767
- [Draine 1990] DRAINE, B. T.: Evolution of interstellar dust. In: L. BLITZ (Hrsg.): *The Evolution of the Interstellar Medium* Bd. 12, 1990, S. 193–205
- [Duschl u. a. 1996] DUSCHL, W. J.; GAIL, H.-P.; TSCHARNUTER, W. M.: Destruction processes for dust in protoplanetary accretion disks. In: *A&A* 312 (1996), August, S. 624–642
- [Duschl u. a. 2000] DUSCHL, W. J.; STRITTMATTER, P. A.; BIERMANN, P. L.: A note on hydrodynamic viscosity and selfgravitation in accretion disks. In: A&A 357 (2000), Mai, S. 1123–1132
- [Dutrey u. a. 1997] DUTREY, A.; GUILLOTEAU, S.; GUELIN, M.: Chemistry of protosolar-like nebulae: The molecular content of the DM Tau and GG Tau disks. In: A&A 317 (1997), Januar, S. L55–L58
- [Dutrey u. a. 2007] DUTREY, A. ; HENNING, T. ; GUILLOTEAU, S. ; SEMENOV, D. ; PIÉTU, V. ; SCHREYER, K. ; BACMANN, A. ; LAUNHARDT, R. ; PETY, J. ; GUETH, F.: Chemistry in disks. I. Deep search for N2H⁺ in the protoplanetary disks around LkCa 15, MWC 480, and DM Tauri. In: A&A 464 (2007), März, S. 615–623
- [Ehrenfreund u. a. 2002] EHRENFREUND, P. ; IRVINE, W. ; BECKER, L. ; BLANK, J. ; BRUCATO, J. R. ; COLANGELI, L. ; DERENNE, S. ; DESPOIS, D. ; DUTREY, A. ; FRAAIJE, H. ; LAZCANO, A. ; OWEN, T. ; ROBERT, F. ; INTERNATIONAL SPACE SCIENCE INSTITUTE ISSI-TEAM: Astrophysical and astrochemical insights into the origin of life. In: H. LACOSTE (Hrsg.): *Exo-Astrobiology* Bd. 518, November 2002, S. 9–14

- [El-Gamal 1995] EL-GAMAL, M.: Simulation der Rußbildung in vorgemischten Verbrennungssystemen. Thesis. Institut fuer Thechnische Verbrennung, University of Stuttgart, 1995
- [Fagan u. a. 2001] FAGAN, T. J.; MCKEEGAN, K. D.; KROT, A. N.; KEIL, K.: Calciumaluminum-rich Inclusions in Enstatite Chondrites (II): Oxygen Isotopes. In: *Meteoritics* and Planetary Science 36 (2001), Februar, S. 223–230
- [Finocchi und Gail 1997] FINOCCHI, F.; GAIL, H.-P.: Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. III. The role of ionisation processes. In: A&A 327 (1997), November, S. 825–844
- [Finocchi u. a. 1997] FINOCCHI, F. ; GAIL, H.-P. ; DUSCHL, W. J.: Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. II. Carbon dust oxidation. In: A&A 325 (1997), September, S. 1264–1279
- [Gail 1998] GAIL, H.-P.: Chemical reactions in protoplanetary accretion disks. IV. Multicomponent dust mixture. In: A&A 332 (1998), April, S. 1099–1122
- [Gail 2001] GAIL, H.-P.: Radial mixing in protoplanetary accretion disks. I. Stationary disc models with annealing and carbon combustion. In: *A&A* 378 (2001), Oktober, S. 192–213
- [Gail 2002] GAIL, H.-P.: Radial mixing in protoplanetary accretion disks. III. Carbon dust oxidation and abundance of hydrocarbons in comets. In: *A&A* 390 (2002), Juli, S. 253–265
- [Gail 2004] GAIL, H.-P.: Radial mixing in protoplanetary accretion discs IV. Metamorphosis of the silicate dust complex. In: *A&A* 413 (2004), S. 571–591
- [Geers u. a. 2006] GEERS, V. C. ; AUGEREAU, J.-C. ; PONTOPPIDAN, K. M. ; DULLEMOND, C. P. ;
 VISSER, R. ; KESSLER-SILACCI, J. E. ; EVANS, N. J. ; VAN DISHOECK, E. F. ; BLAKE, G. A. ;
 BOOGERT, A. C. A. ; BROWN, J. M. ; LAHUIS, F. ; MERÍN, B.: C2D Spitzer-IRS spectra of disks around T Tauri stars. II. PAH emission features. In: A&A 459 (2006), November, S. 545–556
- [Grossman 1972] GROSSMAN, L.: Condensation in the primitive solar nebula. In: Geochim. Cosmochim. Act. 36 (1972), Juni, S. 597–619
- [Grossman 1980] GROSSMAN, L.: Refractory inclusions in the Allende meteorite. In: Annual Review of Earth and Planetary Sciences 8 (1980), S. 559–608
- [Haisch u. a. 2001] HAISCH, K. E.; LADA, E. A.; LADA, C. J.: Disk Frequencies and Lifetimes in Young Clusters. In: ApJ 553 (2001), S. L153–L156

- [Hirschfelder u. a. 1964] HIRSCHFELDER, J. O. ; CURTISS, C. F. ; BIRD, R. B. ; HIRSCHFELDER,
 J. O., CURTISS, C. F., AND BIRD, R. B. (Hrsg.): *Molecular theory of gases and liquids*. 1964
- [Hoppe 2004] HOPPE, P.: Stardust in Meteorites. In: WITT, A. N. (Hrsg.); CLAYTON, G. C. (Hrsg.); DRAINE, B. T. (Hrsg.): Astrophysics of Dust Bd. 309, Mai 2004, S. 265-+
- [Hoppe u. a. 1994] HOPPE, P. ; AMARI, S. ; ZINNER, E. ; IRELAND, T. ; LEWIS, R. S.: Carbon, nitrogen, magnesium, silicon, and titanium isotopic compositions of single interstellar silicon carbide grains from the Murchison carbonaceous chondrite. In: *ApJ* 430 (1994), August, S. 870–890
- [Hueso und Guillot 2005] HUESO, R. ; GUILLOT, T.: Evolution of protoplanetary disks: constraints from DM Tauri and GM Aurigae. In: A&A 442 (2005), S. 703
- [Huss u. a. 1995] Huss, G. R.; FAHEY, A. J.; RUSSEL, S. S.; WASSERBURG, G. J.: Oxygen Isotopes in Refractory Oxide Minerals from Primitive Chondrites. In: *Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts* Bd. 26, März 1995, S. 641–+
- [Ireland und Fegley 2000] IRELAND, T. R.; FEGLEY, B. J.: The Solar System's earliest chemistry: Systematics of refractory inclusions. In: *International Geology Review* v 42 (2000), S. 865–894
- [Irvine u. a. 2000] IRVINE, W. M.; SCHLOERB, F. P.; CROVISIER, J.; FEGLEY, B.; MUMMA, M. J.: Comets: a Link Between Interstellar and Nebular Chemistry. In: *Protostars and Planets IV* (2000), Mai, S. 1159–+
- [Jacobsen u. a. 2008] JACOBSEN, B.; YIN, Q.-Z.; MOYNIER, F.; AMELIN, Y.; KROT, A. N.; NAGASHIMA, K.; HUTCHEON, I. D.; PALME, H.: ²⁶Al ²⁶Mg and ²⁰⁷Pb ²⁰⁶Pb systematics of Allende CAIs: Canonical solar initial ²⁶Al/²⁷Al ratio reinstated. In: *Earth and Planetary Science Letters* 272 (2008), Juli, S. 353–364
- [Jenkins 2004] JENKINS, E. B.: Interstellar Atomic Abundances. In: Origin and Evolution of the Elements (2004), S. 336-+
- [Jones u. a. 1996] JONES, A. P. ; TIELENS, A. G. G. M. ; HOLLENBACH, D. J.: Grain shattering in shocks: The interstellar grain size distribution. In: *ApJ* 469 (1996), S. 740–764
- [Jones u. a. 2000] JONES, R. H.; LEE, T.; CONNOLLY, H. C.; LOVE, S. G.; SHANG, H.: Formation of Chondrules and CAIs: Theory VS. Observation. In: *Protostars and Planets IV* (2000), Mai, S. 927–+

- [Kaneda u. a. 2011] KANEDA, H. ; ONAKA, T. ; SAKON, I. ; ISHIHARA, D. ; MOURI, A. ; YA-MAGISHI, M. ; YASUDA, A.: PAH evolution in the harsh environment of the ISM. In: EAS Publications Series Bd. 46, März 2011, S. 157–168
- [Kastner u. a. 1997] KASTNER, J. H.; ZUCKERMAN, B.; WEINTRAUB, D. A.; FORVEILLE, T.: X-ray and molecular emission from the nearest region of recent star formation. In: *Science* 277 (1997), S. 67–71
- [Krumholz u. a. 2007] KRUMHOLZ, M. R. ; KLEIN, R. I. ; MCKEE, C. F. ; BOLSTAD, J.: Equations and Algorithms for Mixed-frame Flux-limited Diffusion Radiation Hydrodynamics. In: *ApJ* 667 (2007), September, S. 626–643
- [Lahuis u. a. 2006] Lahuis, F.; van Dishoeck, E. F.; Boogert, A. C. A.; Pontoppidan, K. M.; Blake, G. A.; Dullemond, C. P.; Evans, N. J.; Hogerheijde, M. R.; Jørgensen, J. K.; Kessler-Silacci, J. E.; Knez, C.: Hot Organic Molecules toward a Young Low-Mass Star: A Look at Inner Disk Chemistry. In: *ApJ* 636 (2006), Januar, S. L145–L148
- [Larson 1989] LARSON, R. B.: The Evolution of Protostellar Disks. S. 31–54. In: WEAVER,
 H. A. (Hrsg.); DAINLY, L. (Hrsg.): The Formation and Evolution of Planetary Systems,
 Cambridge University Press, 1989
- [Larson 2003] LARSON, R. B.: The physics of star formation. In: Reports on Progress in Physics 66 (2003), Oktober, S. 1651–1697
- [Lewis u. a. 1979] LEWIS, J. S.; BARSHAY, S. S.; NOYES, B.: Primordial Retention of Carbon by the Terrestrial Planets. In: *Icarus* 37 (1979), S. 190–206
- [Li 2009] LI, A.: PAHs in Comets: An Overview. In: H. U. KÄUFL AND C. STERKEN (Hrsg.): Deep Impact as a World Observatory Event: Synergies in Space, Time, and Wavelength, 2009, S. 161–+
- [Lin und Papaloizou 1985] LIN, D. N. C.; PAPALOIZOU, J.: On the dynamical origin of the solar system. In: BLACK, D. C. (Hrsg.); MATTHEWS, M. S. (Hrsg.): *Protostars and Planets II*, 1985, S. 981–1072
- [MacPherson u. a. 2004] MACPHERSON, G. J.; SIMON, S. B.; DAVIS, A. M.; GROSSMAN, L.; KROT, A. N.: Ca-, Al-Rich Inclusions and Ameoboid Olivine Aggregates: What We Know and Don't Know About Their Origin. In: A. KROT, E. SCOTT, K. KEIL, AND B. REIPURTH (Hrsg.): Workshop on Chondrites and the Protoplanetary Disk, November 2004, S. 9104
- [MacPherson u. a. 2005] MACPHERSON, G. J.; SIMON, S. B.; DAVIS, A. M.; GROSSMAN, L.; KROT, A. N.: Calcium-Aluminum-rich Inclusions: Major Unanswered Questions. In:

A. N. KROT, E. R. D. SCOTT, AND B. REIPURTH (Hrsg.): *Chondrites and the Protoplanetary Disk* Bd. 341, Dezember 2005, S. 225-+

- [MacPherson u. a. 1988] MACPHERSON, G. J.; WARK, D. A.; ARMSTRONG, J. T.: Primitive material surviving in chondrites Refractory inclusions. S. 746–807. In: KERRIDGE, J. F. AND MATTHEWS, M. S. (Hrsg.): Meteorites and the Early Solar System, 1988
- [Marinov u. a. 1996] MARINOV, N. M.; PITZ, W. J.; WESTBROOK, C. K.; CASTALDI, M. J.; SENKAN, S. M.: Modeling of Aromatic and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Formation in Premixed Methane and Ethane Flames. In: *Combust, Sci. and Tech.* 116 (1996), S. 211–287
- [Marsal 1976] MARSAL, D.: Die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen in Wissenschaft und Technik. Zürich: B.I.–Wisenschaftsverlag, 1976
- [Mathis u. a. 1977] MATHIS, J. S.; RUMPL, W.; NORDSIECK, K. H.: The size distribution of interstellar grains. In: ApJ 217 (1977), Oktober, S. 425–433
- [McKeegan u. a. 1998] McKeegan, K. D. ; LESHIN, L. A. ; RUSSELL, S. S. ; MACPHERSON, G. J.: Oxygen Isotopic Abundances in Calcium- Aluminum-Rich Inclusions from Ordinary Chondrites: Implications for Nebular Heterogeneity. In: *Science* 280 (1998), April, S. 414– +
- [Mendybaev u. a. 2002] MENDYBAEV, R. A.; BECKETT, J. R.; GROSSMAN, L.; STOLPER, E.; COOPER, R. F.; BRADLEY, J. P.: Volatilization kinetics of silicon carbide in reducing gases: an experimental study with applications to the survival of presolar grains in the solar nebula. In: *Geochim. Cosmochim. Act.* (2002), Februar, S. 661–682
- [Mie 1908] MIE, G.: Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen.In: Annalen der Physik 330 (1908), S. 377–445
- [Nagahara und Ozawa 1996] NAGAHARA, H.; OZAWA, K.: Evaporation of forsterite in H2 gas. In: Geochim. Cosmochim. Act. 60 (1996), April, S. 1445–1459
- [Nguyen u. a. 2007] NGUYEN, A. N. ; STADERMANN, F. J. ; ZINNER, E. ; STROUD, R. M. ; ALEXANDER, C. M. O. ; NITTLER, L. R.: Characterization of Presolar Silicate and Oxide Grains in Primitive Carbonaceous Chondrites. In: *ApJ* 656 (2007), Februar, S. 1223–1240
- [NIST 2008] NIST: http://webbook.nist.gov/chemistry. (2008)
- [Nittler u. a. 1996] NITTLER, L. R. ; AMARI, S. ; ZINNER, E. ; WOOSLEY, S. E. ; LEWIS, R. S.: Extinct 44Ti in Presolar Graphite and SiC: Proof of a Supernova Origin. In: *ApJ* 462 (1996), Mai, S. L31+

- [Oberg u. a. 2011] OBERG, K. I.; QI, C.; FOGEL, J. K. J.; BERGIN, E. A.; ANDREWS, S. M.; ESPAILLAT, C.; WILNER, D. J.; PASCUCCI, I.; KASTNER, J. H.: Disk Imaging Survey of Chemistry with SMA: II. Southern Sky Protoplanetary Disk Data and Full Sample Statistics. In: ArXiv e-prints (2011), April
- [Press u. a. 1992] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P.; PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. (Hrsg.): Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing. 1992
- [Pringle 1981] PRINGLE, J. E.: Accretion discs in astrophysics. In: ARA&A 19 (1981), S. 137–162
- [Qi u. a. 2003] QI, C. ; KESSLER, J. E. ; KOERNER, D. W. ; SARGENT, A. I. ; BLAKE, G. A.: Continuum and CO/HCO⁺ Emission from the Disk Around the T Tauri Star LkCa 15. In: *ApJ* 597 (2003), November, S. 986–997
- [Ruden und Pollack 1991] RUDEN, S. P. ; POLLACK, J. B.: The dynamical evolution of the protosolar nebula. In: ApJ 375 (1991), Juli, S. 740–760
- [Schenk u. a. 2008] SCHENK, O. ; BOLLHOEFER, M. ; ROEMER, R.: On large-scale diagonalization techniques for the Anderson model of localization. Featured SIGEST paper in the SIAM Review selected ön the basis of its exceptional interest to the entire SIAM community. In: SIAM Review 50 (2008), S. 91–112
- [Schenk und Gärtner 2004] SCHENK, O. ; GÄRTNER, K.: Solving Unsymmetric Sparse Systems of Linear Equations with PARDISO. In: *Journal of Future Generation Computer Systems* 20(3) (2004), S. 475–487
- [Schenk und Gärtner 2006] SCHENK, O. ; GÄRTNER, K.: On fast factorization pivoting methods for symmetric indefinite systems. In: *Elec. Trans. Numer. Anal.* 23 (2006), S. 158– 179
- [Schönke 2010] Schönke, J.: Zur Entstehung von Sternen and protoplanetaren Scheiben. Heidelberg, Univ., Diss., 2010, 2010
- [Schönke und Tscharnuter 2011] Schönke, J.; TSCHARNUTER, W. M.: Protostellar collapse of rotating cloud cores. Covering the complete first accretion period of the stellar core. In: *A&A* 526 (2011), Februar, S. A139+
- [Semenov u. a. 2005] SEMENOV, D. ; PAVLYUCHENKOV, Y. ; SCHREYER, K. ; HENNING, T. ; DUL-LEMOND, C. ; BACMANN, A.: Millimeter Observations and Modeling of the AB Aurigae System. In: ApJ 621 (2005), März, S. 853–874

- [Shakura und Syunyaev 1973] SHAKURA, N. I. ; SYUNYAEV, R. A.: Black holes in binary systems. Observational appearance. In: A&A 24 (1973), S. 337–355
- [Tscharnuter 1987] TSCHARNUTER, W. M.: A collapse model of the turbulent presolar nebula. In: *A&A* 188 (1987), Dezember, S. 55–73
- [Tscharnuter u. a. 2009] TSCHARNUTER, W. M. ; SCHÖNKE, J. ; GAIL, H.-P. ; TRIELOFF, M. ; LÜTTJOHANN, E.: Protostellar collapse: rotation and disk formation. In: A&A 504 (2009), S. 109–113
- [Wehrstedt und Gail 2002a] WEHRSTEDT, M. ; GAIL, H.-P.: Radial mixing in protoplanetary accretion disks. II. Time dependent disk models with annealing and carbon combustion. In: *A&A* 385 (2002), April, S. 181–204
- [Wehrstedt und Gail 2002b] WEHRSTEDT, M. ; GAIL, H.-P.: Radial mixing in protoplanetary accretion disks. II. Time dependent disk models with annealing and carbon combustion. In: *A&A* 385 (2002), April, S. 181–204
- [Weidenschilling und Cuzzi 1993] WEIDENSCHILLING, S. J.; CUZZI, J. N.: Formation of planetesimals in the Solar Nebula. In: Levy, E. H. (Hrsg.); LUNINE, J. I. (Hrsg.): *Protostars* and Planets III. Tucson : University of Arizona Press, 1993, S. 1031–1060
- [Wilhelm 1970] WILHELM, H. E.: Kinetic Theory of Subsonic and Supersonic Transport Processes in Weakly Ionized Gases. In: *IL Nuovo Cimento* LXVIII B, N. 2 (1970), S. 189– 207
- [Zhukovska u. a. 2008] ZHUKOVSKA, S. ; GAIL, H.-P. ; TRIELOFF, M.: Evolution of interstellar dust and stardust in the solar neighbourhood. In: *A&A* 479 (2008), Februar, S. 453–480
- [Zubko u. a. 2004] ZUBKO, V.; DWEK, E.; ARENDT, R. G.: Interstellar dust models consistent with extinction, emission, and abundance constraints. In: *A&AS* 152 (2004), S. 211–249

Danksagung

Als erstes möchte ich mich bei Herrn Prof. Gail für das interessante und spannende Thema bedanken. Ich danke ihm auch für die hilfreichen und interessanten Diskussionen, die wesentlich zum Erfolg der Arbeit beigetragen haben. Danke für die vielen interessanten und vielseitigen Gespräche zur Physik und Chemie. Ich konnte vieles von Ihnen lernen.

Ein Dank gilt auch an Herrn Prof. Trieloff für das Erstellen des zweiten Gutachtens.

Ich danke Hern Gail und meinem Mann Stephan für das Korregieren der zahlreichen grammatikalischen Fehler in meiner Arbeit. Diese Korrekturen haben viel zur sprachlichen Schönheit dieser Arbeit beigetragen.

Ich bedanke mich bei meinen Bürokollegen Ulrich, Svitlana und Johannes für das angenehme Arbeitsklima. Ich bedanke mich bei Johannes für die Empfehlung des PARDISO–Lösers. PARDISO hat mir viel Zeit gespart. Ich bedanke mich auch bei Gregor für die interessanten Gespräche während der Mittagspause.

Auch bei Herrn Prof. Tscharnuter möchte ich mich für interessante Diskussionen bedanken. Ein Dank gilt an ihn und Johannes für das Bereitstellen der Kollapsmodelle, die bei der Modellierung der Entstehung der CAIs sehr wichtig waren.

Ich bedanke mich herzlich bei unseren Administratoren Emanuel, Philipp und Robi. Vielen Dank, dass ihr eure Zeit für meine Computerproblemme gespendet habt.

Für meine Finanzierung danke ich der Universität Heidelberg. Ich bedanke mich bei der Forschergruppe 759 für die Finanzierung meiner Dienstreisen. Ein Dank gilt auch an die IMPRS für das dreimonatige Stipendium. Für die Hilfe bei der Lösung der organisatorischen Fragen bedanke ich mich bei Christian Fendt.

Ein besonderer Dank geht an meine Eltern und Stephan. Danke, dass ihr mich so sehr unterstüzt habt. Ohne eure moralische Unterstützung wäre es mir sehr schwer gefallen, die zahlreiche Hindernisse während der Arbeit zu überwinden. Danke, dass ihr immer für mich da wart.