

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

vorgelegt von  
**Hans Gunter Kaliwoda**  
aus Mexiko-Stadt

**Tag der mündlichen Prüfung: 09.04.2008**



**Chemische Entwicklung metallarmer Objekte  
während der protostellaren Phase**

**Gutachter: Prof. Dr. H.-P. Gail  
Prof. Dr. R. Klessen**



## Zusammenfassung

Die Sterne der ersten Generation, sog. PopulationIII-Sterne, sind per Definition jene, die sich aus der primordialen Gasmischung, die im wesentlichen aus Wasserstoff, Helium und winzigen Spuren Lithium und Beryllium bestanden hat, gebildet haben. Ihre besondere chemische Zusammensetzung hat eine andere Entstehung und Entwicklung als man sie bei heutigen Sternen beobachten kann zur Folge. Ein entscheidender Unterschied in ihrer Entstehung liegt in der Abwesenheit der heute wichtigsten Kühler, so dass molekularem Wasserstoff als wichtigstem Kühlagens eine entscheidende Rolle zukommt. Somit besteht eine starke Kopplung zwischen der chemischen, thermischen und dynamischen Entwicklung des Gases. In der vorliegenden Arbeit wurde die protostellare Phase der Entstehung von PopulationIII-Sternen, ausgehend von einer homogenen, ruhenden Wolke bis zu Akkretionsphase, mit Hilfe von sphärisch symmetrischen numerischen Simulationsrechnungen modelliert. Hierbei wurden die Hydrodynamik, der Strahlungstransport in grauer Näherung und die chemische Entwicklung des Gases erstmals konsistent in einem Modell mit impliziter Zeitintegration implementiert. In einer Reihe von Modellrechnungen mit unterschiedlichen Anfangswerten wurden die Auswirkungen der chemischen Zusammensetzung auf die Entwicklung des Gases untersucht, darüber hinaus wird durch Verwendung unterschiedlicher Opazitäten des Gases der primordiale mit dem heutigen Fall verglichen.

## Abstract

First generation stars, so called Population III stars, by definition are those that formed out of the primordial gas mixture, which was composed of hydrogen, helium and very small trace amounts of lithium and beryllium. Due to their singular chemical composition the formation and evolution of Population III stars differed from that of present-day stars. One significant difference during their formation is the absence of today's most important coolants, so that molecular hydrogen plays an essential role as the main cooling agent. Therefore there is a strong coupling between the chemical, thermal and dynamical evolution of the gas. This thesis presents the modelling of the protostellar phase of Population III star formation, starting with an homogeneous, stationary cloud going until the accretion phase using spherically symmetric simulations which include the hydrodynamics, radiation transport in grey approximation, and chemical evolution, for the first time consistently implemented in one model that uses an implicit scheme for the time integration. In a series of model calculations with different initial values the impact of the chemical composition on the evolution of the gas is explored; furthermore a comparison between the primordial and the present day's case is performed using different gas opacities.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Strukturbildung und Sternentstehung im frühen Universum</b>	<b>7</b>
1.1 Bildung prästellarer Klumpen . . . . .	7
1.2 Entstehung der ersten Sterne . . . . .	11
<b>2 Grundgleichungen</b>	<b>23</b>
2.1 Protostellarer Kollaps . . . . .	23
2.1.1 Jeanskriterium . . . . .	23
2.1.2 Typische Skalen . . . . .	24
2.2 Strukturgleichungen . . . . .	25
2.2.1 Strahlungshydrodynamik . . . . .	25
2.3 Materialfunktionen und Zustandsgleichungen . . . . .	28
2.3.1 Opazität . . . . .	28
2.3.2 Zustandsgleichung . . . . .	34
<b>3 Chemie im frühen Universum</b>	<b>37</b>
3.1 Urknall und primordiale Nukleosynthese . . . . .	37
3.2 Primordiale Häufigkeiten . . . . .	38
3.2.1 Vorhersage primordialer Häufigkeiten aus SBBN-Rechnungen . .	38
3.2.2 Primordiale Häufigkeiten aus Beobachtungen . . . . .	40
3.2.3 Kombination von theoretischen Vorhersagen und Beobachtungen	43
3.3 Gasphasenchemie . . . . .	45
3.3.1 Molekülbildungsmechanismen . . . . .	45
3.4 Die ersten chemischen Prozesse im Universum . . . . .	48
3.4.1 Helium . . . . .	50
3.4.2 Wasserstoff und Deuterium . . . . .	50

## INHALTSVERZEICHNIS

---

3.4.3	Lithium . . . . .	52
3.5	Thermische Entwicklung des Gases . . . . .	54
3.6	Chemisches Netzwerk . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Numerisches Verfahren</b>	<b>61</b>
4.1	Zeitintegration mit LIMEX . . . . .	61
4.2	Räumliche Diskretisierung . . . . .	63
4.2.1	Advektion . . . . .	64
4.2.2	Künstliche Viskosität . . . . .	65
4.3	Adaptives Gitter . . . . .	67
4.4	Gesamtes Gleichungssystem in diskretisierter Form . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Simulationsrechnungen</b>	<b>75</b>
5.1	Abschätzung der Strukturparameter . . . . .	75
5.2	Konstruktion der Anfangsmodelle . . . . .	77
5.2.1	Anfangswerte der Strukturvariablen . . . . .	77
5.2.2	Randbedingungen . . . . .	81
5.2.3	Allgemeines zu den Anfangsmodellen . . . . .	83
<b>6</b>	<b>Modellrechnungen</b>	<b>85</b>
6.1	Vorbemerkungen . . . . .	85
6.2	Modellrechnungen ohne chemische Entwicklung . . . . .	87
6.2.1	Modelle mit unterschiedlichem Absorptionskoeffizienten . . . . .	88
6.2.2	Einfluss der Anfangsbedingungen . . . . .	99
6.2.3	Vergleich mit früheren Rechnungen . . . . .	107
6.3	Modellrechnungen einschließlich chemischer Entwicklung . . . . .	108
6.3.1	Die Etappen der Sternentstehung . . . . .	112
6.3.2	Struktur des Objekts am Ende der Rechnung . . . . .	114
6.3.3	Zeitliche Entwicklung der Modelle . . . . .	117
6.3.4	Massenakkretion . . . . .	127
6.4	Variation der Modellannahmen . . . . .	129
6.4.1	Opazität variabel . . . . .	129
6.4.2	Anfangstemperatur konstant, Anfangsteilchendichte und Opazität variabel . . . . .	129
6.4.3	Anfangsteilchendichte konstant, Anfangstemperatur und Opazität variabel . . . . .	133



6.4.4 Unterschiedliche chemische Anfangszusammensetzung . . . . .	133
6.5 Vergleich mit früheren Rechnungen . . . . .	133
6.6 Folgerungen für die Entstehung von PopIII-Sternen . . . . .	137
<b>Zusammenfassung und Diskussion</b>	<b>141</b>
<b>A Numerische Lösung der Strahlungstransportgleichung</b>	<b>145</b>
A.1 Grundgleichungen und Definitionen . . . . .	145
A.2 Randbedingungen und Anfangswerte . . . . .	147
A.3 Numerische Berechnung . . . . .	147
<b>B Das chemische Netzwerk</b>	<b>153</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>157</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>159</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>163</b>

## INHALTSVERZEICHNIS

---

# Einleitung

Durch die Kombination von theoretischen Modellen mit immer präziseren Beobachtungen ist es in den letzten Jahren gelungen, unser derzeitiges Weltbild, wonach das Universum aus einem Urknall, den Big Bang, entstanden ist, zu verfeinern.

In den ersten etwa 1000 Sekunden nach dem Urknall wurden die leichten Elemente Wasserstoff, Deuterium, Helium und winzige Spuren von Lithium sowie Beryllium synthetisiert, danach war der primordiale Kernreaktor aufgrund der Ausdehnung des Weltalls bereits zu kalt, um weitere, schwerere Elemente zu erzeugen.

Es folgte eine Epoche der sog. dark ages, in der das Universum nach der Entkopplung von Strahlung und Materie bei einer Rotverschiebung  $z \approx 1100$  kein Licht enthielt. Über diese Periode ist wenig bekannt, das Universum hat sich in dieser Zeit von der anfangs extrem gleichmäßigen zu einer komplex strukturierten Form entwickelt. Wann und wie dies im Detail passiert ist, ist eine der zurzeit wichtigen Fragen der Kosmologie. Diese dunkle Phase wurde nach dem derzeitigen Kenntnisstand (WMAP-Messungen des ersten Jahres, Spergel et al. [56]) bei einer Rotverschiebung  $z = 17 \pm 5$ , als das Universum durch die Strahlung der ersten leuchtenden Objekte reionisiert wurde, beendet.

Es ist noch immer unklar, ob die ersten leuchtenden Objekte Sterne oder Quasare waren, aber unabhängig davon waren Sterne der ersten Generation aus mehreren Gründen für die weitere Entwicklung der Materie im Universum von großer Bedeutung, denn sie haben u.a.:

- einen Beitrag zur Reionisation des Universums geleistet, und evtl. sogar einen Abdruck in der kosmischen Hintergrundstrahlung CMB hinterlassen (Bromm, Coppi, Larson [9]),
- zur Anreicherung des intergalaktischen Mediums (IGM) mit Metallen durch Synthese von schweren Elementen beigetragen, aus denen sich später Sterne der zweiten und dritten Generation sowie Planeten gebildet haben.

PopulationIII-Sterne (kurz PopIII-Sterne) sind per Definition die Sterne der ersten Generation, die sich dadurch auszeichnen, dass sie sich aus dem primordialen Gas, d.h. mit einem verschwindend kleinen Anteil an Elementen schwerer als Helium gebildet haben (Metallhäufigkeit  $Z = 0$ ). Geht man von derzeitigen empirischen Befunden aus, muss die erste Sterneneration als hypothetisch angesehen werden; es gibt jedoch theoretische Gründe, die für die Existenz von PopIII-Sternen sprechen.

Obwohl es (noch) keine Beobachtungen, die die möglichen Werte für Größen wie Ausdehnung oder Masse der ersten Objekte einschränken helfen könnten, gibt, ist das Pro-

blem der Bildung der ersten Sternengeneration aus theoretischer Sicht im Rahmen eines kosmologischen Modells ein wohldefiniertes Problem. Nach der Inflationsphase des frühen Universums bildeten sich aus Dichtefluktuationen Strukturen aus dunkler Materie (DM), deren Gravitationswirkung die gewöhnliche (baryonische) Materie folgte. Es ist unbestritten, dass dunkle Materie bei der Entstehung und Bildung großräumiger Strukturen eine wichtige Rolle gespielt hat. Ob sich die Dunkle Materie auch unmittelbar auf die Bildung und Entstehung von PopIII-Sternen ausgewirkt hat, ist derzeit ungeklärt. Es z.B. gibt Überlegungen (astro-ph0709.2369v1 14 Sept 2007), nach denen DM die Entwicklung von PopIII-Sternen beeinflussen könnte, indem der Protostern bzw. Kern durch die durch Anihilation supersymmetrischer Teilchen (Neutralinos) frei werdende Energie aufgeheizt und damit sein Kollaps gebremst, wenn nicht angehalten wurde. Es würde eine neue Art von Objekt, dark star genannt, entstehen: ein Stern, der statt durch Kernfusion durch DM-Anihilation aufrecht erhalten wird. Über die Lebensdauer dieses Zustandes, und damit über Auswirkungen auf das Universum (Masse der PopIII-Sterne, Erzeugung schwerer Elemente, Reionisation des Universums), wird spekuliert. Diese Art von Überlegungen spielen in der hier vorliegende Arbeit keine Rolle.

Die charakteristische Mindesttemperatur, die eine aus primordialen, atomaren Gas bestehende Wolke erreichen kann, liegt bei etwa 200 K; dieser Wert hängt mit den Kühleigenschaften des Gases zusammen: Bei geringer Dichte, wenn das Gas den lokalen thermischen Gleichgewichtszustand noch nicht erreicht hat, kühlt sich die primordiale Materie nach Stoßanregung durch Emission eines Photons ab. Im lokalen thermischen Gleichgewicht – der kritische Wert, bei dem in diesem Temperaturbereich der Übergang vom NLTE zum LTE stattfindet, liegt bei ca.  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  – findet die Abregung hauptsächlich durch Stöße statt. Der LTE-Effekt ist proportional zur Teilchenzahl, im Gegensatz zur NLTE-Photonemission, die proportional zur Teilchenzahl zum Quadrat ist, d.h. die Kühlung ist im LTE-Fall wesentlich ineffizienter. Diese Eigenschaft des primordialen Gases hat wichtige Folgen: Bei den momentan akzeptierten Modellen hierarchischer Strukturbildung werden zuerst die kleineren, d.h. die kühleren Objekte gebildet, so dass unter der Annahme rein atomaren Gases die ersten Objekte sich erst recht spät (Rotverschiebung  $z \lesssim 10 \dots 15$ ) aus mäßig massiven Halos von ca.  $10^8 M_\odot$  gebildet hätten. In Kapitel 1 dieser Arbeit wird etwas näher auf die Thematik der Strukturbildung im frühen Universum eingegangen.

Kapitel 2 befasst sich mit den Mechanismen der Sternentstehung. Ein zentraler Begriff ist der der Jeansmasse  $M_J$ , d.h. der Masse, ab der eine Wolke gegebener Masse und Temperatur gravitativ instabil wird. Nimmt man die typischen Werte einer Wolke primordialer Zusammensetzung ( $T \approx 10 \text{ K}$ ,  $n \approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ), erhält man eine Jeansmasse von einigen tausend Sonnenmassen, was den Schluss nahe legt, dass PopIII-Sterne massereicher als PopI-Sterne, deren typische Jeansmasse aufgrund der niedrigeren Temperatur (Kühlung u.a. durch Staub und CO) von etwa 10 K eher im Bereich weniger Sonnenmassen liegt, gewesen sein müssten. Die IMF von PopIII-Sternen ist umstritten; die vorhergesagten Werte schwanken zwischen  $0,1 M_\odot$  und  $200 M_\odot$  (Palla, Salpeter & Stahler [43], Abel et al. [2], Hutchings et al. [23]). Nakamura & Umemura [38] schlagen eine bimodale IMF vor, die bei einer bzw.  $10 M_\odot$  Maxima aufweist. Die Ergebnisse neuerer Arbeiten, in denen die Entstehung von Strukturen im frühen Universum dreidimensional simuliert wird (Abel [1], Banerjee et al. [6]), tendieren zu eher hohen Massen, weil bei der Entstehung von Strukturen, die einer primordialen Molekülwolke

entsprechen würden, ab einem gewissen Punkt keine Fragmentation mehr beobachtet wird.

Die Frage, ob sich aus einer primordialen Gaswolke ein (Proto-)Stern bilden kann, hängt entscheidend davon ab, ob das Gas in der Lage ist die während der Kontraktion der Wolke frei werdende Gravitationsenergie abzustrahlen, wodurch der Kollaps erst ermöglicht bzw. aufrecht erhalten wird. Das thermische (hydrodynamische) Verhalten des Gases hängt wiederum von seiner chemischen Zusammensetzung ab; so besitzen Moleküle mehr Energiezustände niedriger Anregungsenergie, über die nach Stoßanregung die thermische Energie des Gases abgestrahlt werden kann, als Atome. Aus diesem Grund ist für das Verständnis der Kühlprozesse im Gas die Kenntnis seiner chemischen Zusammensetzung so wichtig.

Moleküle beeinflussen die Kühleigenschaften von (primordialem) Gas bei tiefen Temperaturen in erheblicher Weise; durch ihre Anwesenheit ändert sich das Gesamtbild dramatisch; falls der kritische Wert für den H<sub>2</sub>-Anteil überschritten wird, hätten sich erste Objekte schon bei  $z \gtrsim 20$  aus massearmen Halos gebildet. Da dem primordialen Gas im Vergleich zum heutigen interstellaren Gas die wichtigsten Kühler fehlten, kommt als wichtigster Kühlagens nur molekularer Wasserstoff in Frage, der sich in der Gasphase, insbesondere bei geringer Dichte, nur schlecht bilden kann. Dennoch handelt es sich hierbei um das häufigste Molekül, so dass H<sub>2</sub> trotz seiner schlechten Kühleigenschaften die chemische Spezies ist, die im Wesentlichen das thermische Verhalten des primordialen Gases festlegt<sup>1</sup>.

Die verhältnismäßig geringe Anzahl chemischer Spezies, aus denen primordiales Gases besteht, bringt vergleichsweise einfache chemische Netzwerke mit sich; dennoch scheitert eine exakte Modellierung an der Unkenntnis einiger Reaktionsraten insbesondere bei geringer Dichte und Temperatur, so dass je nach angenommener Rate die erhaltenen Häufigkeiten zumindest während einiger Phasen der Entwicklung durchaus um eine Größenordnung auseinander liegen können, wie in Glover [21] bzw. den dort genannten Referenzen (insbes. Glover et al. [22]) gezeigt wird.

Galli & Palla [20] haben gezeigt, dass ein Netzwerk mit 21 Spezies und 87 Reaktionen, das sich auf auf 33 Reaktionen (von den Autoren Minimalmodell genannt) reduzieren lässt, ausreicht, um die Häufigkeiten (und daraus abgeleitet das thermische Verhalten) des Gases im Fall geringer Dichte ausreichend genau zu modellieren. Bei höherer Dichte müssen weitere Reaktionen, z.B. Dreiteilchenprozesse, die zur Bildung von H<sub>2</sub> beitragen, einbezogen werden. Dennoch bleibt das Netzwerk übersichtlich; zur Modellierung der chemischen Vorgänge im heutigen interstellaren Gas sind tausende Reaktionen notwendig, so beinhaltet die UMIST Datenbank [47] aus dem Jahr 2006 mehr als 400 Spezies und über 4000 Reaktionen.

Entscheidend für die thermische Entwicklung des Gases ist die Häufigkeit des wichtigsten Kühlers, H<sub>2</sub>, und der Spezies aus denen es entlang des Reaktionspfades aufgebaut wird. Das dritte Kapitel dieser Arbeit befasst sich mit den chemischen Prozessen im frühen Universum, wobei die Prozesse, die zur Bildung und Zerstörung molekularen Wasserstoffs beitragen, besondere Aufmerksamkeit erhalten.

---

<sup>1</sup>Andere Spezies wie HD oder LiH haben pro Molekül eine höhere Kühlleistung, sind aber stets zu unterhäufig um die Eigenschaften des primordialen Gases zu beeinflussen, es sei denn die Temperatur liegt in einem Bereich, der weit unter dem liegt, der im Rahmen dieser Arbeit von Interesse ist.

Simulationsrechnungen waren schon immer ein wichtiges Werkzeug in der Astrophysik; dies gilt insbes. für den Themenbereich des frühen Universums, wo wenige oder teilweise, wie bei der Entstehung und Entwicklung von PopIII-Sternen, keine Beobachtungsdaten zur Verfügung stehen.

Modellrechnungen, die die Entstehung und Entwicklung von Sternen abbilden, sind nicht neu. Arbeiten wie die von Penston [44] haben sich in vereinfachten Modellen mit der Entwicklung von isothermen Kugeln, Bonnor-Ebert-Kugeln und dergleichen beschäftigt. Die Sternstrukturgleichungen – sie sind in dieser Arbeit Gegenstand des zweiten Kapitels – wurden numerisch erstmals im Jahr 1969 von Larson [29] gelöst. Die Modelle waren sehr vereinfacht, was vor allem mit der begrenzten Rechenleistung der damaligen Zeit zusammenhing.

In den letzten Jahren sind aufwendige dreidimensionale AMR<sup>2</sup>-Rechnungen möglich geworden, in denen die Strukturbildung im frühen Universum ab einem sehr frühen Zeitpunkt nachvollzogen werden konnte. Diese Simulationen sind aber (noch) nicht in der Lage bis in den Bereich der Sternentstehung vorzudringen, denn es ist bisher nicht möglich die nötige Auflösung (typischerweise kommen diese Rechnungen bis zu einer Dichte von etwa  $10^{10} \text{ cm}^3$  bis  $10^{11} \text{ cm}^3$ ; der stellare Wert liegt bei ca.  $10^{24} \text{ cm}^3$ ) und Genauigkeit bei der Lösung der hydrodynamischen Gleichungen zu erreichen; SPH<sup>3</sup>-Methoden kommen etwas weiter, diese haben aber den Nachteil, dass die Massenauflösung in der Regel bereits am Anfang der Rechnung festgelegt ist, außerdem ist die Behandlung von Stößen problematisch. Bei der Behandlung des Strahlungstransports begnügt man sich in der Regel mit dem optisch dünnen Fall, was im Bereich dieser Rechnungen gerechtfertigt, im Fall der Sternentstehung aber nicht ausreichend ist.

Soll das Problem in angemessener Weise untersucht werden und dennoch handhabbar bleiben, bleiben gewisse Vereinfachungen also auch heute noch unumgänglich. Nicht ungewöhnlich ist die Reduktion des Problems auf eine Dimension. Diese Vorgehensweise hat den Nachteil, dass weder Drehimpuls einbezogen, noch der Frage nach Fragmentation nachgegangen werden kann. Dafür können aber praktisch alle als relevant angesehenen physikalischen Prozesse in den Modellen enthalten sein, insbes. eine detaillierte Behandlung des Strahlungstransports auch im optisch dicken Fall. Es gibt zahlreiche Arbeiten, die sich analytischer bzw. semianalytischer Argumente bedienen und z.T. grobe Vereinfachungen was (je nach Schwerpunkt) den strahlungshydrodynamischen oder den chemischen Anteil angeht, machen. Je nach Modellannahmen können sie zu unterschiedlichen Schlüssen kommen; beispielsweise was den oben angedeuteten Verlauf der IMF betrifft (s. Kapitel 2).

Auch die hier vorliegende Arbeit gehört zu denen, die das Problem eindimensional behandeln. Bei den hier präsentierten Modellrechnungen handelt es sich um sphärisch symmetrische Simulationsrechnungen, bei denen die Gleichungen der Strahlungshydrodynamik mit grauem Strahlungstransport und einem chemischen Netzwerk auf einem adaptiven, gestaffelten Gitter mit der Methode der finiten Volumina diskretisiert wurden. Die Einzelheiten der Implementierung werden im vierten Kapitel dargelegt. Die hier vorliegende Arbeit unterscheidet sich vom Standpunkt der technischen Umsetzung von anderen, thematisch ähnlichen Arbeiten (oft zitiert werden die Arbeiten von Omu-

---

<sup>2</sup>Adaptive Mesh Refinement

<sup>3</sup>Smoothed Particle Hydrodynamics

kai & Nishi [42] und Ripamonti et al. [50]) vor allem dadurch, dass es erstmals gelungen ist, alle Teilaspekte – Hydrodynamik, Strahlungstransport, Chemie – konsistent in einem Modell zu implementieren. Darüber hinaus wurde zur Lösung des Gleichungssystems ein implizites Schema benutzt: die Zeitskalen, auf denen sich die hydrodynamischen und die chemischen Prozesse abspielen, unterscheiden sich um viele Größenordnungen<sup>4</sup>, man spricht von einem steifen Gleichungssystem. Ein explizites Schema zur Lösung des Gleichungssystems, wie es u.a. von Omukai&Nishi [42], benutzt wird, ist durch die Courant-Frierichs-Levy-Bedingung außerordentlich rechenzeitaufwendig und kaum praktikabel. Die Einschränkungen an den Zeitschritt durch die CFL-Bedingung werden durch die Anwendung eines impliziten Verfahrens für die Zeitintegration umgangen.

Die Konstruktion der Modelle einschließlich der Wahl der Anfangsbedingungen werden im fünften Kapitel beschrieben, in Kapitel 6 werden die Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt, die mit einer zusammenfassenden Diskussion abgeschlossen wird.

In den Anhängen sind sind die Beschreibungen der numerischen Lösung der Strahlungstransportgleichung und das chemische Netzwerk nachzulesen.

---

<sup>4</sup>Tausende Jahre für die freie Fallzeit einer protostellaren Wolke gegenüber Mikrosekunden bei bestimmten chemischen Reaktionen.





# Kapitel 1

## Strukturbildung und Sternentstehung im frühen Universum

Nach derzeitiger Vorstellung haben sich die ersten Sterne und Quasare am Ende der sog. dark ages (einige  $10^8$  Jahre nach dem Urknall) gebildet. Durch Beobachtungen der CMB-Anisotropien kann der Zustand des Universums bei  $z \approx 1100$  (ca.  $10^6$  Jahre nach dem Urknall) untersucht werden, bei  $z \lesssim 6$  (ca.  $10^9$  Jahre nach dem Urknall) ist Entsprechendes über die Beobachtung der Quasarabsorptionslinien und Ly $\alpha$ -Emission von Galaxien möglich. Über die dazwischenliegende Epoche, den sog. dark ages, ist wenig bekannt. In dieser Zeit hat sich das Universum von einer anfangs extrem gleichmäßigen zu einer komplex strukturierten Form entwickelt. Wann und wie dies im Detail passiert ist, ist eine der zurzeit wichtigen Fragen der Kosmologie.

### 1.1 Bildung prästellarer Klumpen

Mit Hilfe stets besserer Beobachtungsdaten ist es gelungen, die Parameter der kosmologischen Modelle<sup>1</sup> immer weiter einzuschränken, so dass man heute in der Lage ist, von etablierter kosmologischer Modellen zu sprechen (u.a. Spergel et al. [56]). Im Rahmen dieser Modelle entstehen Strukturen hierarchisch durch Verschmelzung kleinerer Einheiten.

Es wird vorhergesagt, dass sich die ersten Sterne in DM-Halos von etwa  $10^6 M_\odot$  bei einer Rotverschiebung von  $z = 20, \dots, 30$  gebildet haben. Deren Temperatur  $T_{\text{vir}} \sim M^{2/3}(1+z)$  liegt unter der Schwelle für die effiziente Kühlung durch Wasserstoffatome ( $T \approx 10^4$  K). Kühlung muss also durch molekularen Wasserstoff stattfinden, was zur Folge hat, dass das thermodynamische Verhalten des primordialen Gases durch die H<sub>2</sub>-Kühlung bestimmt wird. Daher ist es wichtig, die Nichtgleichgewichtsschemie von H<sub>2</sub> zu verstehen. Bei Abwesenheit von Staub kann sich molekularer Wasserstoff nur auf vergleichsweise ineffizienter Weise in der Gasphase gebildet haben (s. Abschnitt 3.4.2).

---

<sup>1</sup>flaches,  $\Lambda$ -dominiertes Universum,  $h$ ,  $\Omega_b h^2$ ,  $\Omega_m h^2$ ,  $\sigma_8$

Da es derzeit keine Beobachtungsdaten für die Periode der Pop III-Sternentstehung gibt, muss auf numerische Simulationen ausgewichen werden um die dynamischen, thermischen und chemischen Eigenschaften des primordialen Gases zu untersuchen. Zwei- bzw. eindimensionale Modelle sind handhabbarer, bedeuten aber auch stärkere Idealisierungen. So wurde in früheren Arbeiten (z.B. Palla et al. [43] oder Puy & Signore [49]) mit der Lösung von chemischen Netzwerken die chemische Entwicklung und Kühlung des primordialen Gases untersucht, die Kollapsmodelle waren aber stark idealisiert. Inzwischen sind mehrdimensionale Simulationen praktikabel geworden: Abel et al. [1] haben selbstkonsistente dreidimensionale kosmologische Simulationen von Hydrodynamik im Rahmen der Strukturbildung in einem  $\Lambda$ CDM dominiertem Universum durchgeführt. Ein wichtiges Ergebnis dieser Arbeit war die Entstehung massearmer Halos ( $10^5, \dots, 10^8 M_\odot$ ), die bei einer Rotverschiebung zwischen 50 und 30 kollabieren. Nennenswerte Kühlung fand nur in Kernen der (sphärischen) Kreuzungspunkte von Filamenten statt. Darin war nur ein kleiner Anteil der gebundenen Baryonen in der Lage schnell abzukühlen ( $< 10\%$ ), daher die Vorhersage, dass Pop III-Cluster nicht sehr massereich waren. Die räumliche Auflösung war auf 1 kpc beschränkt, so dass es unmöglich war, den Kollaps bis zu stellaren Dichten zu verfolgen. In Abel et al. [2] wurde dieser Punkt deutlich verbessert, indem der hydrodynamische Teil des Modells mit Hilfe der adaptive mesh refinement-Technik (AMR<sup>2</sup>) simuliert wurde. Des Weiteren wurde neben der dunklen Materie die zeitabhängige chemische Entwicklung (mit neun Spezies, vor allem in Hinblick auf die Kühlung des Gases) implementiert. Die Simulation des  $\Lambda$ CDM-Modells begann bei  $z = 100$ . Sobald eine Dichtestörung (high- $\sigma$ -peak) identifiziert wurde, wurde dessen Lagrangevolumen in mehreren Verfeinerungsschritten des Gitters verfolgt.

Nur an den Stellen, an denen sich die filamentartigen Gasstrukturen überlappten, bildeten sich primordiale Molekülwolken. Ihre Entwicklung war durch die häufige Verschmelzung von Strukturen gekennzeichnet, so dass sich komplexe Dichte- und Geschwindigkeitsfelder ergaben. Die Kerne dieser Molekülwolken waren aber nahezu sphärisch. Sie hatten typischerweise eine Masse von etwa  $5 \cdot 10^5 M_\odot$ . Ihre Entstehungsgeschichte kann, abhängig von der Rotverschiebung<sup>3</sup>, in vier Intervalle unterteilt werden:

1. Nur durch dunkle Materie dominierte Objekte kollabieren.
2. Baryonische Objekte kollabieren. Die Kühlung ist noch ineffizient, so dass sich keine dichten Kerne bilden können. Die Masse des größten Klumpens nimmt durch Verschmelzung mit anderen Klumpen zu, ebenso dessen Temperatur und der  $H_2$ -Anteil  $f_{H_2}$ .
3. Sobald  $f_{H_2}$  einige  $10^{-4}$  erreicht hat, beginnt molekularer Wasserstoff für die Kühlung des Gases wichtig zu werden. Die Zentraltemperatur fällt, gleichzeitig steigt die Dichte weiter an. Bei  $n_c \approx 10^4 \text{ cm}^{-3}$  gehen die angeregten  $H_2$ -Zustände ins

---

<sup>2</sup>Bei der AMR-Technik wird eine Region im Raum von einem Gitter (parent grid) überspannt, das an den Stellen, an denen eine höhere Auflösung nötig wird, durch ein feineres, höherauflösendes Gitter (child grid) ersetzt wird. Dieses Gitter kann wiederum Ausgangspunkt einer weiteren Gitterverfeinerung werden.

<sup>3</sup>Die Zahlenwerte hängen von den Parametern des kosmologischen Modells ab, die ablaufenden physikalischen Prozesse dagegen nicht.

LTE über, damit wird die Kühlzeitskala annähernd dichteunabhängig (im Fall niedrigerer Dichte ist sie proportional zu  $\rho^{-1}$ ).

4. Bildung eines sehr kleinen und dichten Kerns. Von diesem Punkt an brechen vorausgesetzte Näherungen (optisch dünne Kühlung, Strahlungstransporteffekte beginnen wichtig zu werden) zusammen. Ab hier waren keine quantitativen Aussagen mehr möglich. Die Autoren legen Wert darauf, dass die Simulation durch (nicht implementierte) Physik, nicht durch die erzielbare Auflösung begrenzt war. Die Dreiteilchenprozesse setzten ab  $n \approx 10^8 \text{ cm}^{-3}$  ein, wobei die Kühlrate durch den höheren  $\text{H}_2$ -Anteil um einen Faktor 1000 erhöht wird. Dadurch verkürzt sich die dynamische Zeitskala im Kern, d.h. die Entwicklung von umgebenden Halo und Molekülwolke wird entkoppelt; nur letztere ist an der Sternbildung beteiligt. Im weiteren Verlauf der Entwicklung kann entweder ein massiver Stern entstehen oder die Wolke während der quasihydrostatischen Phase aufgrund einer thermischen Instabilität zerbrechen, womit letztendlich mehrere Sterne geringerer Masse gebildet würden. Welcher Fall eintritt, war aufgrund dieser Simulation nicht zu sagen, da sie abgebrochen werden musste, nachdem der Zeitschritt zu kurz wurde. Es ist aber anzunehmen, dass, nachdem sich der erste Stern (wahrscheinlich in der Nähe des Zentrums der Molekülwolke, da hier die Zeitskala am kürzesten ist) gebildet hat, dessen Strahlung den Akkretionsprozess verlangsamt bzw. ganz anhält. Sehr massive Objekte oder gar SMBHs wurden auf diesem Wege also wahrscheinlich nicht gebildet (s.u.).

Einzelne Protosterne konnten auch bei dieser Simulation nicht aufgelöst werden, wohl aber die kollabierenden protostellaren Wolkenkerne aus denen sie entstehen. Diese hatten in der Simulation, ähnlich wie heutige Molekülwolken, typischerweise eine Masse von  $200 M_{\odot}$ ,  $0,3 \text{ pc}$  Ausdehnung bei einer Teilchendichte von etwa  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ . Im Unterschied zu heutigen Molekülwolken lag der Anteil molekularen Wasserstoffs nahe  $5 \cdot 10^{-4}$ , so dass die weitere Entwicklung ganz anders als im heutigen Fall verlaufen musste.

In einer Arbeit von Bromm, Coppi und Larson [9] werden im Rahmen der Untersuchung der Anfangsphase der kosmischen Strukturbildung Kollaps und Fragmentation primordialer, metallfreier Wolken mittels dreidimensionaler SPH-Simulationen von Gas und dunkler Materie (CDM) simuliert. Im Gegensatz zu Abel et al. [2] wird aber nur der Kollaps einer isolierten, überdichten Region verfolgt. Dieser Ansatz hat den Nachteil, dass die Wechselwirkung mit der Materie auf großen Skalen und damit die Gezeiteauswirkungen, die den Drehimpuls der kollabierenden Struktur erzeugen, ignoriert werden. Daher muss der Drehimpuls als freier Parameter in die Modelle eingehen. Der Vorteil dieser Herangehensweise liegt darin, dass das Verhalten des Gases mit weniger Aufwand für einen größeren Bereich von Anfangsbedingungen untersucht werden kann. In diesem Sinne kann diese Arbeit als komplementär zu der von Abel et al. [2] betrachtet werden.

Die Entwicklungen der dunklen Materie und der Gaskomponente werden mit einer hierarchischen SPH-Methode<sup>4</sup> berechnet, das chemische Reaktionsnetzwerk implizit gelöst. Nachdem ein Gaselement kollabiert (runaway collapse) und dessen Teilchendichte einen bestimmten Wert überschreitet, wird die Rechnung aufgrund der CFL-Bedingung<sup>5</sup> ex-

---

<sup>4</sup>Es handelt sich um eine Kombination aus SPH-Hydrodynamik und einem hierarchischen gravity solver, TREESPH genannt.

<sup>5</sup>Courant-Friedrichs-Levi-Bedingung Abschnitt 4.2, Seite 63

trem verlangsamt. Das eigentliche Ziel der Publikation ist nicht, die Entwicklung einzelner Protosterne zu verfolgen, sondern die Beschaffenheit der ersten Sterne am Ende der Freifallphase einzuschränken. Um die Beschränkung durch die CFL-Bedingung zu überwinden und die Entwicklung des gesamten Systems über den Zeitpunkt der Entstehung der ersten nichtlinearen Region hinaus verfolgen zu können, werden gravitativ gebundene Teilchen ab einer bestimmten Teilchendichte ( $10^8 \text{ cm}^{-3}$ ) zu sog. sink-particles zusammengefasst und deren Einzelentwicklung zu höheren Teilchendichten nicht weiter verfolgt. In der weiteren Entwicklung nimmt die Masse der Materieklumpen durch Akkretion und vor allem durch Verschmelzung mit anderen Klumpen zu (so können bis zu  $10^4 M_\odot$  erreicht werden). Diese Ereignisse hängen allerdings empfindlich von den Anfangsbedingungen ab und sind für die vorliegende Arbeit nicht weiter von Bedeutung.

Wichtigstes Ergebnis im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit ist, dass das Gas – relativ unabhängig von den Anfangswerten des Modells und in Übereinstimmung mit der Arbeit von Abel et al. [1] – charakteristische Werte von Temperatur und Dichte annimmt, woraus auch eine typische Massenskala für Pop III-Sterne abgeleitet werden kann.

Die Simulationsrechnungen von Bromm, Coppi und Larson [9] sowie Abel, Bryan und Norman [2] ergeben trotz unterschiedlicher Methoden und Ansätze übereinstimmend ähnliche, charakteristische Werte von Temperatur und Dichte für das primordiale Gas. Dies liegt an der bereits erwähnten Mikrophysik des Wasserstoffs, wobei es auf zwei in diesem Kontext wichtige Eigenschaften von molekularem Wasserstoff ankommt:

- Die niedrigste Temperatur, die ein Gas durch  $\text{H}_2$ -Kühlung erreichen kann, liegt bei wenigen hundert Kelvin. In Abschnitt 3.5 (Seite 54) wird etwas näher darauf eingegangen.
- Bei einer Temperatur von  $100, \dots, 200 \text{ K}$  geht die Niveaubesetzung der  $\text{H}_2$ -Moleküle von NLTE nach LTE über, wenn die Teilchendichte bei etwa  $10^3, \dots, 10^4 \text{ cm}^{-3}$  liegt. Dann ist die Kühlrate gesättigt.

Diese Werte ergeben eine Masse von etwa  $10^3 M_\odot$ , die nahe an der charakteristischen Jeansmasse liegt. Daraus wird der Schluss gezogen, dass die ersten Sterne wahrscheinlich massereich ( $M \gtrsim 10^2 M_\odot$ ) waren.

Ein weiteres Argument für die Existenz massereicher Pop III-Sterne wird aus Beobachtungsdaten von IGM-Absorptionslinien in Quasarspektren abgeleitet: Im intergalaktischen Medium (IGM) wurden Metalle in Absorptionslinien von Quasarspektren beobachtet, die aus einer Zeit stammen, als das Universum etwa ein Zehntel seines heutigen Alters hatte. Dies bedeutet, dass innerhalb der ersten  $10^9$  Jahre nach dem Urknall schwere Elemente erzeugt, an das IGM abgegeben und verteilt worden sein müssen. Da Elemente schwerer als Lithium nicht im Urknall, sondern in Sternen synthetisiert werden, bleiben als einziger bekannter Mechanismus zur Anreicherung des IGM mit Metallen zu einem so frühen Zeitpunkt die Supernovaexplosionen massereicher Sterne. Daraus wird geschlossen, dass (wenn auch nicht notwendigerweise ausschließlich) bei der ersten Sterneneration massereiche Sterne entstanden sein müssen (Abel et al. [3]). Allerdings wird nicht angenommen, dass primordiale protostellare Wolken so massereich gewesen sind, dass sie direkt in schwarze Löcher kollabiert sind: Numerische Simulationen der

Entstehung von supermassiven schwarzen Löchern (SMBH) haben ergeben, dass diese sich erst nach einer Sternentstehungsperiode gebildet haben, da als unwahrscheinlich gilt, dass sich ein SMBH direkt aus dem Kollaps einer (primordialen) Gaswolke bilden kann (s. z.B. Loeb & Rasio [34]). Die direkte Bildung eines SMBH wird durch die kinetische Energie aus Supernovaexplosionen, die das Zusammenklumpen des Gases im Zentrum des DM-Potentialtopfes verhindert, unterdrückt. Es wird angenommen, dass Quasare durch die bei der Akkretion auf SMBHs entstehende Wärme angetrieben werden. Es scheint also plausibel, dass Sterne bereits vor der Bildung der ersten Quasare existiert haben. Diese wiederum haben sich nach derzeitiger Vorstellung durch Akkretion auf supermassive schwarze Löcher bei  $z \approx 10$  gebildet. Die ersten Sterne hätten sich also *vor* den ersten Quasaren gebildet, d.h. Quasare und deren Einfluss auf das ISM hätten bei der Entstehung und Entwicklung der ersten Sterne keine Rolle gespielt.

Dieser Abschnitt sollte eine – keineswegs vollständige – Übersicht zu diesem Themenkomplex geben und illustrieren, dass es inzwischen ein relativ gefestigtes theoretisches Bild der Phase der Strukturbildung im frühen Universum *vor* der Bildung der ersten Sterne gibt. Es ist in letzter Zeit gelungen, die freien Parameter der theoretischen Modelle mit Hilfe von Beobachtungsdaten (insbes. WMAP, s. Spergel [56]) soweit einzuschränken, dass von einem etablierten Modell der kosmologischen Strukturbildung im frühen Universum gesprochen wird. Die aus diesen Modellen gewonnenen Daten können als Anfangswerte der Sternstrukturparameter von numerischen Simulationsrechnungen der primordialen Sternentstehung benutzt werden, wie in Abschnitt 5.1 beschrieben wird.

## 1.2 Entstehung der ersten Sterne

Die Sternbildung im heutigen Universum ist ein Vorgang, dessen Komplexität teilweise mit der komplizierten Mischung metallreichen Gases und Staubs zusammenhängt. Der Zustand des Universums zur Entstehungszeit der Pop III-Sterne ist wesentlich einfacher zu beschreiben:

- Es gab weder Metalle noch Staub. Damit war Wasserstoff (atomar und molekular) Hauptkühler und -opazitätsquelle des primordialen Gases. Die chemischen und radiativen Prozesse im primordialen Gas sind gut verstanden. Die Kühlung des Gases findet im Wesentlichen durch Wasserstoff (in atomarer und molekularer Form) statt. Der Beitrag anderer Spezies zur Gaskühlung ist aufgrund der Häufigkeiten wahrscheinlich unerheblich (nur HD und LiH könnten bei tiefen Temperaturen eine Rolle gespielt haben).
- Es werden keine starken Magnetfelder erwartet.
- Per Definition gibt es keine anderen Sterne, welche die Sternentstehung durch Strahlung, Sternwinde oder Supernovae beeinflussen könnten.
- Es wird angenommen, dass es im IGM keine turbulenten Bewegungen gab.
- Die Anfangsbedingungen können aus dem inzwischen als etabliert geltenden Standardmodell der Strukturbildung abgeleitet werden.

Diese Vereinfachungen machen die Behandlung des Problems deutlich handhabbarer, denn die wesentlichen physikalischen Prozesse reduzieren sich auf Gravitation, thermischen Druck, Drehimpuls und Strahlungstransport.

Trotz dieser Vereinfachung gibt es bis heute kein theoretisches Gerüst, das die Vorhersage der initial mass function (IMF) aus ersten Prinzipien ermöglichen würde<sup>6</sup>. Dieser Punkt wird in den Veröffentlichungen von Nakamura & Umemura [37], [38] und [39] aufgegriffen. Untersucht wurde die Entwicklung filamentartiger Strukturen mit dem Ziel eine Abschätzung der Masse von Pop III-Sternen zu ermöglichen. Simuliert wird die thermische und dynamische Entwicklung von filamentartigen, primordialen Gaswolken mit Hilfe eindimensionaler Hydrodynamik in Verbindung mit Nichtgleichgewichtschemie von Wasserstoff. Während der Rechnung zerfällt die Wolke in eine Hülle und einen dichten zentralen Teil, der (von  $n_c = 10^5 \text{ cm}^{-3}$  bis  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ) quasistatisch kontrahiert. Dieser Teil der Wolke erwies sich während des Kollapses als instabil bzgl. Fragmentation. Die Masse des Sterns liegt zwischen 3 und  $16 M_\odot$ . Im Unterschied zu [37] wird in [38] die Entwicklung des Filaments mit Hilfe von ein- und zweidimensionaler Hydrodynamik und chemischer Nichtgleichgewichtsprozesse von Wasserstoff simuliert. Die Anfangswerte der Zentraldichte lagen zwischen  $10, \dots, 10^6 \text{ cm}^{-3}$ . Es haben sich zwei Situationen herausgestellt, die zur Fragmentation führen können: Bei geringer Anfangsdichte ( $< 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) kann die Kühlzeitskala länger als die freie Fallzeit werden. Dies liegt daran, dass die Dichte zu niedrig bleibt, um den Wasserstoff effizient über Dreiteilchenprozesse von der atomaren in die molekulare Form zu überführen, so dass die Wolke nicht effektiv gekühlt werden kann. Die Endmasse liegt in diesem Fall im Bereich einiger  $10 M_\odot$ . Falls die Anfangsdichte des Filaments dagegen oberhalb von  $10^5 \text{ cm}^{-3}$  liegt, ist die Kühlung durch  $\text{H}_2$  effizienter, was eine stärkere Kontraktion (bis  $n \approx 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ) zur Folge hat. Sobald die Wolke für  $\text{H}_2$ -Linien optisch dick wird, wird die Kontraktion fast angehalten. Der entstandene hydrostatische Kern hätte eine Masse von etwa  $1 M_\odot$ . Der Wert der Anfangsdichte des Fragments könnte mit dem Zeitpunkt (Rotverschiebung) der Kollapses der Ausgangswolke zusammenhängen. Insgesamt ergibt sich eine bimodale IMF, wobei Sterne subsolarer Masse selten und solche mit Massen zwischen zehn und hundert Sonnenmassen am häufigsten sein sollten. Die bimodale IMF wurde in einer später veröffentlichten Arbeit bestätigt: In Nakamura & Umemura [39] wird der gravitative Kollaps metallarmer Gasfilamente unter Einbeziehung eindimensionaler Hydrodynamik und Nichtgleichgewichtschemie von  $\text{H}_2$  und HD simuliert. Hauptergebnis war, dass die Entwicklung der Wolke in erster Linie von der Anfangsdichte im Zentrum,  $n_{c,0}$ , sowie der Anfangshäufigkeit von molekularem Wasserstoff  $f_{\text{H}_2,0}$  abhängt: Bei Filamenten niedriger Dichte ( $n_{c,0} < 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) hängt die weitere Entwicklung davon ab, ob  $f_{\text{H}_2,0}$  unter oder über dem kritischen Wert  $f_{\text{H}_2,\text{cr}} = 3 \cdot 10^{-3}$  liegt. Ist  $f_{\text{H}_2,0} < f_{\text{H}_2,\text{cr}}$ , wird die Kühlung durch  $\text{H}_2$  dominiert. Das Filament fragmentiert bereits bei Dichten von etwa  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , so dass die Endmasse bei ca.  $100 M_\odot$  liegt. Im Fall  $f_{\text{H}_2,0} > f_{\text{H}_2,\text{cr}}$  fragmentiert das Filament bei  $10^7 \text{ cm}^{-3}$ , die Endmasse beträgt dann ca.  $10 M_\odot$ . Dies hat damit zu tun, dass die Kühlung durch HD hier die durch  $\text{H}_2$  überwiegt. Liegt die Anfangsdichte  $n_{c,0}$  dagegen über  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ , ist die Kühlrate von  $\text{H}_2$  und HD gesättigt und die Kühlung durch  $\text{H}_2$  dominiert. Erreicht die Teilchendichte Werte von um die  $10^8, \dots, 10^9 \text{ cm}^{-3}$ , so wird die Kontraktion durch die Bildung von  $\text{H}_2$  über Dreikörper-

---

<sup>6</sup>Es gibt auch keine fundamentale Theorie der Sternbildung, weder für den primordialen, noch für den heutigen Fall.

prozesse und der sich daraus ergebenden höheren Kühlrate verstärkt. Solange die Wolke bzgl.  $H_2$  optisch dünn bleibt, wird keine weitere Fragmentation erwartet. Das Fragment sollte dann eine Masse von etwa einer bis zwei Sonnenmassen nicht überschreiten.

Die erste Arbeit, in der das Problem des dynamischen protostellaren Kollapses durch numerische Lösung der hydrodynamischen Gleichungen<sup>7</sup> gelöst wurde, war die von Larson [29] aus dem Jahr 1969. Damals war wenig über die Bedingungen, unter denen Sternbildung einsetzt, bekannt. Daher wurde vereinfachend angenommen, dass ein sphärisches Volumen interstellaren Materials gegebener Masse gravitativ instabil wird und kollabiert, weil die Dichte einen bestimmten Minimalwert überschreitet.

Die Grundannahmen waren folgende:

- Simuliert wurde die Entstehung eines Sterns in einer HI-Region, d.h. für das Material wurde typische Pop I-Zusammensetzung angesetzt: Wasserstoff befindet sich in molekularer Form, Staub macht 1% der Gesamtmasse aus.
- Der Staub ist die Hauptopazitätsquelle, nach dessen Verdampfung nimmt die Opazität stark ab bis die molekulare Absorption dominiert.
- Dominanter Heizeffekt ist die Kompression des Materials.
- Dominanter Kühleffekt ist der Energietransfer vom Gas auf den Staub, der seinerseits die Energie abstrahlt.
- Es handelt sich um einen sphärisch symmetrischen Kollaps unter Vernachlässigung von Rotation, Magnetfeldern und interner turbulenter Bewegung.
- Der Außenrand wird räumlich festgehalten, der Radius bleibt konstant.

Solange die Wolke optisch dünn ist, halten sich Heizung und Kühlung die Waage, während dieser Phase verhält sich die Wolke isotherm. Die Rechnungen ergaben, dass die Eigenschaften des Kollapses nicht kritisch von der Wahl der Anfangsbedingungen abhängen.

Die Anfangsdichte hatte einen konstanten Wert. Durch Testrechnungen wurde herausgefunden, dass der Kollaps sicher einsetzt, wenn der Radius folgende Werte unterschreitet:

$$R_{\max} = 0,46 \frac{GM}{\mathcal{R}T} \quad (1.1)$$

$$R_c = 0,41 \frac{GM}{\mathcal{R}T}. \quad (1.2)$$

In diesen Gleichungen ist  $G$  die Gravitationskonstante,  $M$  die Masse der Wolke,  $\mathcal{R}$  die Gaskonstante<sup>8</sup> und  $T$  die Temperatur in Kelvin. Gleichung (1.1) gibt den Radius an, bei dem es zum Kollaps der Wolke kommt, aber noch Oszillationen um den Gleichgewichtspunkt auftreten können. Durch den etwas kleineren Vorfaktor in Gleichung (1.2) wurde sichergestellt, dass die Wolke aus ansonsten beliebigen Anfangsbedingungen kollabierte.

---

<sup>7</sup>In früheren Arbeiten wurde aus vereinfachenden Annahmen (homologer Kollaps, polytrope Dichteverteilung usw.) auf die Eigenschaften des Kollapses geschlossen.

<sup>8</sup>Wert:  $\mathcal{R} = 3,36 \cdot 10^7 \text{ erg g}^{-1} \text{ K}^{-1}$

## 1.2. ENTSTEHUNG DER ERSTEN STERNE

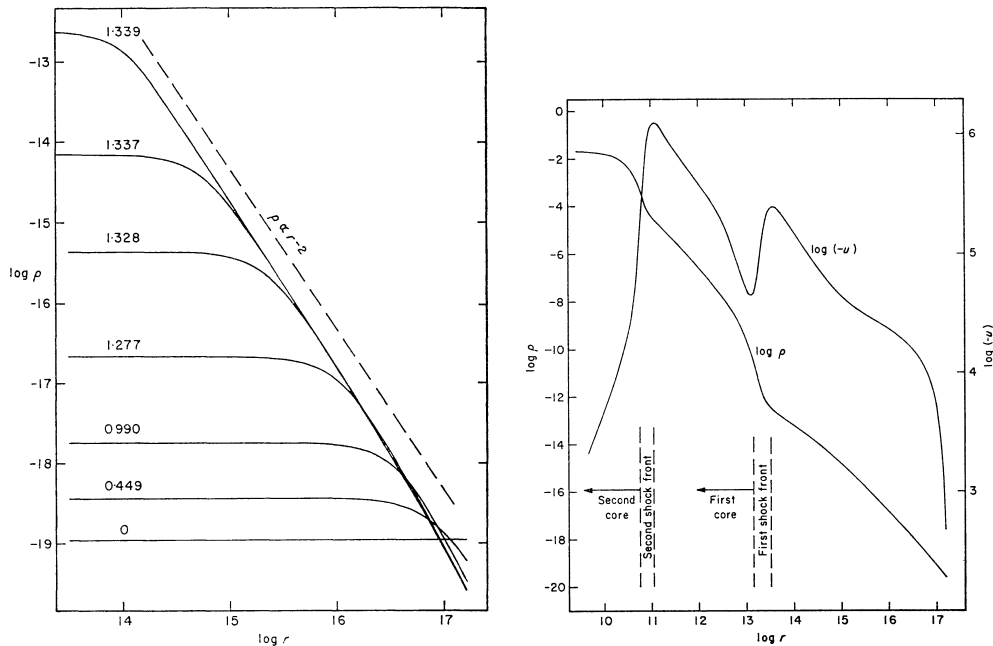


Abbildung 1.1: Links: Zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung einer kollabierenden Wolke. Die verstrichene Zeit ist in Einheiten von  $10^{13}$  s notiert. Die Dichteverteilung entspricht beinahe  $\rho \sim r^{-2}$ . Rechts: Zeitliche Entwicklung der Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung kurz nach der Bildung des zweiten Kerns. (Beide Abbildungen aus Larson [29]).

Gelöst wurden die Gleichungen für Gasdynamik und Strahlungstransport im Eulerschema. Die verwendeten Näherungen sind gültig, solange das Material optisch dick ist und der Energietransport durch Konvektion keine Rolle spielt. In späten Phasen der Entwicklung wird der Energietransport durch Konvektion wichtig, dann wird eine vereinfachte Form der Mischungsweg-Approximation benutzt. Stoßfronten wurden durch künstliche Viskosität ausgeschmiert und in späten Entwicklungsphasen mittels shock fitting (Diskontinuität der Flussvariablen) behandelt.

Die Rechnungen ergaben, dass die Wolke folgende Phasen durchläuft:

1. Isotherme Anfangsphase: Da kein Druckgradient vorliegt, befindet sich das Material im freien Fall ( $t_{\text{ff}} \sim \rho^{-1/2}$ ). Die Dichte steigt innen stärker an als außen, und das auf immer kürzerer Zeitskala auf immer kleinerem Raum: der Kollaps hat nicht-homologen Charakter.
2. Bildung eines optisch dicken Kerns: Eine kleine Region im Zentrum wird optisch dick, sobald die Dichte einen bestimmten Wert überschreitet. Die Kompressionswärme kann nicht mehr frei abgestrahlt werden. Ab hier verläuft die Kompression adiabatisch. Durch den schnellen Anstieg der zentralen Dichte und Temperatur wird der Kollaps gebremst und im Zentrum angehalten. Es bildet sich ein Kern,



der sich dem hydrostatischen Gleichgewicht nähert, während sich das weiter außen liegende Material weiterhin im freien Fall befindet. Ein Stoß entsteht, wenn dieses Material auf den Kern trifft. Der Aufprall verursacht einen Rückstoß und eine Folge von Schwingungen um die Gleichgewichtskonfiguration (die aber klein und daher für die weitere Entwicklung unwichtig sind). Das Material regnet auf den Kern ab, dessen Masse wächst (d.h. die Stoßfront wandert bzgl. der Masse auswärts), während der Kernradius wegen des Energieverlusts durch Abstrahlung schrumpft (d.h. die Stoßfront wandert bzgl. des Radius einwärts).

3. Bildung eines zweiten Kerns: Masse akkretiert weiterhin auf den Kern, der sich dadurch auf ca. 2000 K aufheizt.  $H_2$  beginnt zu dissoziieren, was zur Folge hat, dass das Verhältnis der spezifischen Wärmen unter den kritischen Wert von  $4/3$  fällt. Die hierdurch hervorgerufene Instabilität führt zum Einsetzen des dynamischen Kernkollapses, wobei diesmal die Energie hauptsächlich bei der Dissoziation von  $H_2$  verbraucht wird, was zur Folge hat, dass mit zunehmender Dichte die Temperatur nur langsam ansteigt (diese Situation ist mit der isothermen Anfangsphase der gesamten Wolke vergleichbar). Die Zeitskala im Zentrum wird immer kürzer, wodurch die Zentraldichte immer schneller immer stärker ansteigt. Wenn der Wasserstoff nahezu vollständig dissoziiert ist, liegt das Verhältnis der spezifischen Wärmen wieder oberhalb von  $4/3$ . Der Zentraldruck wird hoch genug um den Kollaps anzuhalten. Ein zentraler Kern im hydrostatischen Gleichgewicht ist entstanden. Das darauf abregnende Material wird schlagartig abgebremst. Zu diesem Zeitpunkt befindet sich der äußere Teil des ersten Kerns noch im Kollaps, die erste Stoßfront existiert immer noch.
4. Expansion des stellaren Kerns: Die Dichte ist bei der Entstehung des zweiten Kerns so hoch, dass das Material praktisch optisch dick und damit der radiative Energieverlust vernachlässigbar ist. Deshalb ist die Stoßfront, die den zweiten Kern begrenzt, anfangs adiabatisch. Materie aus dem ersten Kern fällt weiter auf den zweiten Kern, wodurch der erste entleert wird und die Dichte fällt. Die äußere Stoßfront löst sich mangels Material auf. Aufgrund der Sprungbedingung an der Stoßfront muss die Dichte innerhalb des Stoßes ebenfalls abnehmen. Weil die Temperatur nur geringfügig abnimmt, steigt also die spezifische Entropie des Materials, das auf den zweiten Kern fällt, was zur Folge hat, dass der Radius des zweiten Kerns zunehmen muss. Während der Kern expandiert, nehmen die Zentraltemperatur und -dichte weiter zu, und mit ihnen der Ionisationsgrad. Durch den hohen Ionisationsgrad fällt trotz hoher Dichte das Verhältnis der spezifischen Wärmen nicht mehr unter  $4/3$ , ein weiterer dynamischen Kernkollaps wird so unterbunden.
5. Radiative Abkühlung und Kontraktion des Kerns: Sobald die Dichte außerhalb des Kerns soweit fällt, dass das Material optisch dünn wird, kann die an der Stoßfront aufgestaute Energie abgestrahlt werden. Die Leuchtkraft des Objekts steigt stark an. Durch den Energieverlust an der Stoßfront sinkt die spezifische Entropie des einfallenden Materials, was zur Kontraktion des Kerns führt. Eine Konvektionszone, die sich nach innen auszubreiten beginnt, entsteht. Weil Dichte und Temperatur innerhalb der Stoßfront sinken, nimmt die Opazität ab, so dass der Energietransport durch Strahlung wichtig werden kann. In diesem Fall verliert

der Kern erheblich an Energie (durch Konvektion aus dem Inneren verbunden mit der Abstrahlung an der Oberfläche) wodurch der Radius stark kontrahiert. Die Kernmasse nimmt in dieser Phase nur leicht zu. Der erste Kern einschließlich Stoßfront ist inzwischen vollständig aufgelöst.

6. Hauptakkretionsphase: Während der späten Kollapsphasen ist die thermische Energie des auf die Stoßfront fallenden Materials gegenüber der kinetischen Energie vernachlässigbar. Der radiative Energiefluss aus der Stoßfront entspricht dem kinetischen Energiefluss auf die Stoßfront. Die spezifische Entropie des einfallenden Materials nimmt nicht länger ab, sondern zu, weil die Oberflächentemperatur zunimmt, während der Energieverlust aus dem Inneren abnimmt. Dadurch wird die Kontraktion des Kerns aufgehalten, die Konvektionszone schrumpft und verschwindet. Während die Kernmasse weiterhin stark zunimmt, bleibt der Radius beinahe unverändert (Gegenspiel von steigender Entropie gegen Massenzunahme). Das ganze hat eine deutliche Zunahme von Einfallgeschwindigkeit, Oberflächentemperatur und Leuchtkraft zur Folge. In den späten Kollapsphasen wird der Radius in erster Linie durch die Entropie des Materials im äußeren Bereich des Kerns bestimmt, d.h. die frühe Geschichte wird zunehmend unwichtiger<sup>9</sup>.
7. Endphasen der Entwicklung: Wenn etwa die Hälfte des Materials in den Kern gefallen ist, wiegt die Zunahme der Einfallgeschwindigkeit den Abfall der einfallenden Masse nicht länger auf, so dass der Zufluss an kinetischer Energie abzunehmen beginnt. Infolge dessen nehmen die Oberflächentemperatur und Leuchtkraft ab. Es entsteht wieder eine Konvektionszone, denn die spezifische Entropie des einfallenden Materials nimmt ebenfalls ab. Die Opazität nimmt ab, wodurch der Energieabfluss aus dem Sterninneren an Bedeutung zunimmt. Nachdem fast das gesamte Material auf den Stern abgerechnet ist, wird die Zufuhr an kinetischer Energie im Vergleich zum Energieverlust durch Strahlung vernachlässigbar, d.h. die Leuchtkraft wird hauptsächlich aus dem Inneren des Kerns und nicht mehr durch die Zufuhr kinetischer Energie aufrecht erhalten. Somit ist aus dem Kern ein normaler Stern geworden, dessen Konvektionszone etwa bis zur Hälfte des Kerns hineinreicht (Hayashimodell in konvektiver Vorhauptreihenkontraktionsphase).

Zusammenfassend sind in Abbildung 1.1 die zeitliche Entwicklung von Dichte und radialer Geschwindigkeit aus der Publikation von Larson [29] abgebildet.

Die 1998 veröffentlichte Publikation von Omukai & Nishi [42] kann als aktualisiertes Gegenstück zu Larsons Arbeit [29] mit Pop III-Gasmischung gesehen werden. Hier wird die Entwicklung metallfreier protostellarer Wolken mit eindimensionaler Hydrodynamik, Strahlungstransport von molekularem Wasserstoff (Kontinuum und Linien) und Wasserstoffchemie bis zur Hauptakkretionsphase simuliert. Bei dem hydrodynamischen Teil der Simulation wurde von einer sphärisch symmetrischen Wolke ausgegangen, wobei weder Rotation, noch Magnetfelder, noch ein äußeres Strahlungsfeld (gerechtfertigt durch die

---

<sup>9</sup>wodurch die Auswirkungen von Unsicherheiten und Fehlern am Beginn der Rechnung an Bedeutung verlieren.

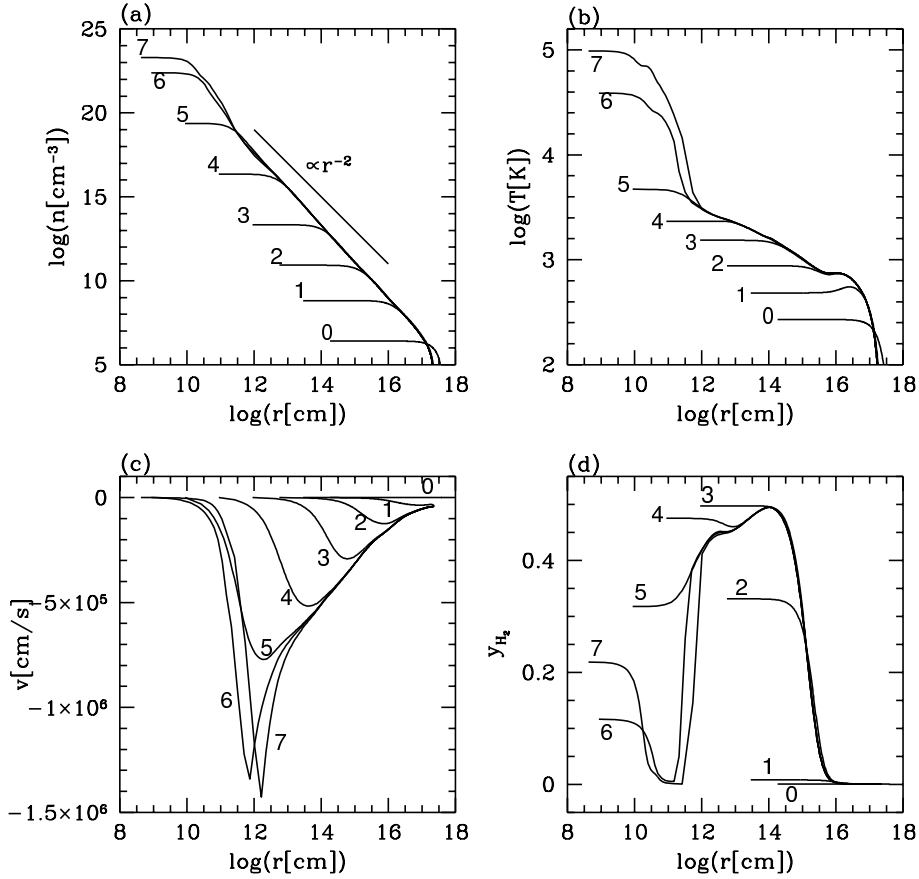


Abbildung 1.2: Entwicklungsphasen einer protostellaren Wolke zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Aufgetragen sind (a) Dichte (b) Temperatur (c) Geschwindigkeit (d)  $\text{H}_2$ -Konzentration, jeweils als Funktion des Radius. Aus Omukai & Nishi [42].

Annahme, dass sich Sterne tief innerhalb von protogalaktischen Wolken gebildet haben, wodurch die Einflüsse durch die kosmische Hintergrundstrahlung insignifikant gewesen sein dürften) berücksichtigt wurden. Benutzt wurde ein expliziter Lagrangecode mit finiten Differenzen und künstlicher Viskosität nach Neumann-Richtmyer.

Zur Simulation der Chemie wurde ein Netzwerk mit 8 Spezies ( $\text{H}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{He}$ ,  $\text{He}^+$ ,  $\text{He}^{++}$ ,  $e^-$ ; He-Häufigkeit 28% nach Masse) implementiert, wobei abhängig von der Teilchendichte auf verschiedene Weise vorgegangen wurde:

- $n_{\text{H}} < 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ : Hier wurde ein implizites Schema für die Reaktionen zwischen den Wasserstoffspezies und den Elektronen benutzt. Die He-Atome sind aufgrund tiefer Temperaturen ( $T < 2100 \text{ K}$ ) und Dichten neutral.
- $n_{\text{H}} > 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ : Der  $\text{H}_2$ -Anteil befindet sich sicher im Gleichgewicht, daher wurde auf Gleichgewichtschemie (Gleichgewichtshäufigkeiten aus Sahagleichungen) umgeschaltet. Obwohl sich die Elektronen in diesem Bereich noch nicht im chemischen Gleichgewicht befinden, ist der dadurch verursachte Fehler klein, da die Elektronen bei der Bildung und Dissoziation von  $\text{H}_2$  keine Rolle mehr spielen.

Zur Behandlung des Strahlungstransports wird angenommen, dass sich das Gas im LTE befindet. Die Strahlungstransportgleichung wird mit der  $pz$ -Methode gelöst (ähnlich wie in Anhang A beschrieben).

Als Opazitätsquellen werden die Rotations- und Vibrationslinien von  $H_2$  wie auch Kontinuumsanteile berücksichtigt, wobei der Strahlungstransport durch Linien (frequenzabhängig) und das Kontinuum (als graues Problem) getrennt behandelt werden. Bei Temperaturen unter 1000 K wird die Opazität Null gesetzt, ab 7000 K werden die Werte von Rogers & Iglesias [51] benutzt, dazwischen das Planckmittel nach Lenzuni, Chernoff und Salpeter [31].

Als Anfangskonfiguration wurde eine Bonnor-Ebert-Kugel gewählt<sup>10</sup>. Sofern das Zentrum gut aufgelöst war, haben sich 100 Gitterzellen als ausreichend erwiesen. In der Simulation durchlief die Wolke folgende Entwicklungsphasen:

1. Kollapsphase: Anfangs befindet sich die Wolke im hydrostatischen Gleichgewicht, die Kühlzeit  $t_{\text{cool}}$  ist etwas länger als die freie Fallzeit  $t_{\text{ff}}$ . Nach einer quasistatischen Kontraktion wird im Zentrum  $t_{\text{cool}}$  kleiner als  $t_{\text{ff}}$ , der dynamische Kollaps setzt ein und zwar im Zentrum (wo die Dichte höher ist) schneller als außen. Der Außenbereich bleibt fast unverändert, der Dichteverlauf entspricht mit beinahe  $\rho \sim r^{-2}$  dem isothermen Fall. Wie die weitere Entwicklung des Zentralbereichs verläuft, hängt vom Wert der Teilchendichte ab:
  - $n_c \gtrsim 10^8 \text{ cm}^{-3}$ : Durch Dreikörperprozesse wird atomarer Wasserstoff in die molekulare Form überführt. Dadurch steigt die Kühlleistung, wodurch die Temperatur in der Zentralregion unter die der Außenbereiche fällt. Der gesamte Wasserstoff wird in  $H_2$  umgewandelt und erst bei hohen Temperaturen dissoziiert. Die ganze Zeit über bleibt der Außenbereich atomar.
  - $n_c \approx 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_c \approx 900 \text{ K}$ : Um das Zentrum herum befinden sich etwa 60% des Wasserstoffs in molekularer Form, einige  $H_2$ -Linien beginnen optisch dick zu werden, wodurch die Kühlrate im Zentrum im Vergleich zu den äußeren Bereichen fällt. Das Verhältnis der spezifischen Wärmen steigt, überschreitet den kritischen Wert von 4/3 aber nicht.
  - $n_c \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_c \approx 1600 \text{ K}$ :  $H_2$  wird teilweise dissoziiert. Gleichzeitig setzt die stoßinduzierte  $H_2$ -Kühlung ein, die so stark ist, dass die Dissoziation angehalten und sogar umgekehrt werden kann. Dieser Prozess läuft solange ab, bis die Wolke bei etwa 2000 K und einer Teilchendichte von ca.  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  optisch dick wird und die Dissoziation wieder einsetzt. Dies ist der Grund dafür, dass sich im Vergleich zu Larsons [29] Modellen kein kurzlebiger Kern bildet. Sobald die Dissoziation von Wasserstoff vollständig einsetzt, erreichen Temperatur und Dichte im Zentrum Werte, die in etwa denen heutiger Protosterne entsprechen. Ab diesem Punkt verläuft auch die Entwicklung von Pop III- und Pop I-Protosternen nahezu gleich.
  - $n_c \approx 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T_c \approx 3 \cdot 10^4 \text{ K}$ : Nachdem die Kontraktion fast adiabatisch verlief, bildet sich ein hydrostatischer Kern von ca.  $10^{-3} M_{\odot}$ , dessen Tempe-

---

<sup>10</sup>Im Rahmen dieser Veröffentlichung wird die primordiale protostellare Wolke als Fragment einer größeren Wolke gesehen, die nach der Fragmentation nahe dem hydrostatischen Gleichgewicht sein muss.

ratur und Dichte vergleichbar mit der von Kernen heutiger Protosterne ist. Eine Stoßfront bildet sich an der Oberfläche des Kerns, der ab jetzt durch Massenakkretion wächst.

2. Akkretionsphase: Die hydrodynamischen Gleichungen wurden mit einem explizitem Schema gelöst, unterlagen daher der CFL-Bedingung. Das hatte zur Folge, dass die Zeitschritte extrem kurz, die Simulationsrechnung dadurch zu rechenzeintensiv wurde. Sie wurde zu einem beliebigen Zeitpunkt nach Bildung des Kerns beendet.

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen von Omukai & Nishi [42] (Entwicklungsphasen der protostellaren Wolke) sind in Abbildung 1.2 dargestellt.

Ähnlich wie in der Arbeit von Omukai & Nishi [42] wird in der von Ripamonti et al. [50] die Entwicklung einer protostellaren Wolke primordialer Zusammensetzung simuliert. Implementiert wurde ein eindimensionaler Lagrange-Code, der neben der Hydrodynamik und der chemischen Entwicklung (sehr ähnlich dem Code von Omukai & Nishi [42] mit einigen Detailänderungen<sup>11</sup>), eine ausführliche Behandlung des Strahlungsfeldes enthält.

Auch hier ergibt sich am Anfang der Entwicklung eine Larson-Penzon selbstähnliche Lösung mit  $\rho \sim r^{-\alpha}$  ( $\alpha \approx 2.2$ ), die mit der Bildung des quasihydrostatischen Kerns zusammenbricht.

Während der Kollapsphase finden die wichtigen Veränderungen (chemisch und thermisch) im Zentrum statt: Sobald die Teilchendichte  $n \approx 10^8 \text{ cm}^{-3}$  überschreitet, setzen die Dreiteilchenreaktionen ein, so dass der Wasserstoff in die molekulare Form übergeht, wodurch die Kühlrate steigt. Das Ineinandergreifen von Heizung bzw. Kühlung durch chemische Reaktionen, Kompression und Strahlung hängt neben der Dichte und Temperatur auch von der optischen Tiefe ab, wobei die relative Stärke der einzelnen Beiträge von der Kombination dieser Größen abhängt.

Am Ende der selbstähnlichen Phase setzt die Dissoziation von molekularem Wasserstoff ein, die wie ein Thermostat wirkt: Durch die verbrauchte Energie wird verhindert, dass die Temperatur und damit der Druck weiter ansteigen und der Kollaps angehalten wird. Bei ca. 20000 K ist der Wasserstoff beinahe vollständig dissoziiert, so dass dieser Effekt entfällt und der Kollaps in der Zentralregion durch den Anstieg von Druck und Temperatur angehalten wird. Außerhalb des Zentrums befindet sich das Gas noch beinahe im freien Fall. Dieses Material bildet beim Aufprall auf den Kern eine Stoßfront. Ab diesem Zeitpunkt wird die weitere Entwicklung des Kerns durch das abregnende Material, einerseits durch den Aufprall, andererseits durch die Kompression und die daraus folgende Aufheizung, bestimmt.

Hat sich ein Kern gebildet, erreicht die H<sub>2</sub>-Häufigkeit keinen nennenswerten Anteil mehr, bildet aber eine Schicht zwischen dem immer stärker ionisierten Zentrum und der atomar gebliebenen Außenregion der Wolke<sup>12</sup>, d.h. die Wolke besteht, was die chemische

---

<sup>11</sup>Berücksichtigung nichtidealer Effekte wie Druckionisation in der Zustandsgleichung nach Saumon et al. [52], Strahlungsdruckterm in der Impulsgleichung.

<sup>12</sup>In dieser Region ändert sich die chemische Zusammensetzung fast nicht, weil die Teilchendichten durchweg sehr gering bleiben.

## 1.2. ENTSTEHUNG DER ERSTEN STERNE

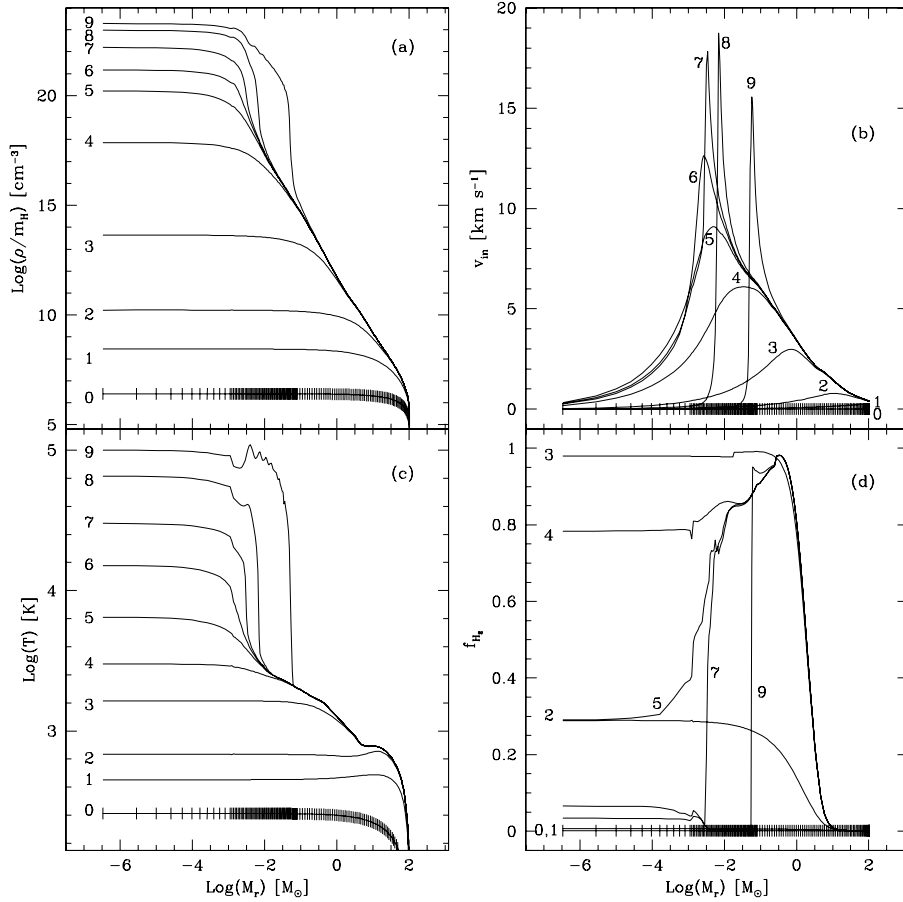


Abbildung 1.3: Aufgetragen ist die Struktur der primordialen protostellaren Wolke in verschiedenen Etappen des Kollapses in Abhängigkeit der Masse innerhalb des Radius  $r(M_r)$ . Es handelt sich um folgende Größen: (a) Dichte (b) Einfallsgeschwindigkeit (c) Temperatur (d) Anteil von Wasserstoffkernen in  $\text{H}_2$ -Molekülen. Bei den dem Anfangszustand zugehörigen Kurven ist die Verteilung der Gitterzellen gekennzeichnet. Aus Ripamonti et al. [50].

Zusammensetzung angeht, aus drei Regionen.

Auch diese Simulationen wurden aufgrund der CFL-Bedingung sehr rechenzeitintensiv, sobald Temperatur und Dichte hohe Werte erreichten. Aus diesem Grund wurde die Rechnung beendet, wenn die Zentraltemperatur  $10^5$  K erreicht hatte. Abbildung 1.3 zeigt die Ergebnisse der Modellrechnungen von Ripamonti et al. [50] in einem im Wesentlichen analogen Plot zu Abbildung 1.2 aus Omukai & Nishi [42].

In diesem Abschnitt wurden die Ergebnisse von oft zitierten, aktuelleren Arbeiten, die sich – ähnlich der hier vorgelegten – mit der protostellaren Phase der Sternentwicklung, insbesondere im primordialen Fall befassen, präsentiert. Es gibt darüber hinaus zahlreiche hier nicht aufgeführte, z.T. ältere Arbeiten, die sich mit dem Problem der Sternentstehung bzw. der Zusammensetzung des primordialen Gases befassen (Referenzen dazu sind in den zitierten Publikationen zu finden). Dabei handelt es sich oft nicht um Rechnungen, sondern teilweise stark vereinfachte Näherungslösungen, da entweder die nötigen Methoden bzw. Ressourcen nicht zur Verfügung standen, oder der

## KAPITEL 1. STRUKTURBILDUNG UND STERNENTSTEHUNG IM FRÜHEN UNIVERSUM

---

protostellare Kollaps an sich nur Teilaspekt der untersuchten Fragestellung war. Im folgenden Abschnitt wird etwas näher auf die theoretische Behandlung des protostellaren Kollapses eingegangen. Die numerische Behandlung des Gesamtproblems wird in Kapitel 4 beschrieben, davor werden in Kapitel 3 die in diesem Zusammenhang wichtigen chemischen Prozesse vorgestellt.

## 1.2. ENTSTEHUNG DER ERSTEN STERNE

---



# Kapitel 2

## Grundgleichungen

### 2.1 Protostellarer Kollaps

Heutige Sterne kondensieren aus der interstellaren Materie; diese ist nicht gleichmäßig im Raum verteilt, sondern konzentriert sich in kühlen Wolken, die im heißen Zwischenwolkenmedium eingebettet sind. Die interstellaren Wolken im heutigen Universum bestehen aus einer Mischung aus Gas (hauptsächlich H, He und geringe Mengen schwererer Elemente) und ca. 1% Massenanteil Staub. Der Staub ist ein weit effizienterer Strahler als das Gas, daher kann die Kompressionsenergie im Laufe des protostellaren Kollapses bei einer Wolke mit heutiger Zusammensetzung (zumindest im optisch dünnen Fall) relativ problemlos im fernen Infrarot abgestrahlt werden. Primordiale Wolken enthielten dagegen weder Staub noch Elemente schwerer als Li (auf die Zusammensetzung des primordialen Gases wird in Kapitel 3 näher eingegangen). Damit entfällt der effizienteste Kühler, was zwangsläufig zur Folge haben muss, dass primordiale Sterne eine andere Entwicklung durchlaufen als heutige Sterne.

Eigentlich handelt es sich bei der Sternentstehung um die letzte einer Reihe von Fragmentationen, die schließlich zu einem Sternembryo führt. Im frühen Universum muss es zur Bildung von Strukturen gekommen sein, aus denen sich nach mehrfacher Fragmentation die Sterne der ersten Generation gebildet haben (Abschnitt 1.1). Das Phänomen der Fragmentation ist von großer Bedeutung, liefert es doch die Anfangsbedingungen für eine numerische Simulation. Da es keine Beobachtungsdaten zur Bildung der Sterne der ersten Generation gibt und die Beobachtungsdaten zur Entstehung heutiger Sterne aufgrund der völlig anderen Bedingungen keine Anhaltspunkte geben, muss auf theoretische Modelle der kosmologischen Strukturbildung im frühen Universum zurückgegriffen werden. Die primordiale IMF ist umstritten, es gibt allerdings eine gewisse Präferenz für höhere Anfangsmassen (Abschnitt 1.2).

#### 2.1.1 Jeanskriterium

Entscheidend bei der Fragmentation einer Gaswolke ist das Jeanskriterium, das besagt, ab welcher Jeansmasse  $M_J$  bzw. welchem Jeansradius  $R_J$  eine Wolke der Masse  $M$ , Dichte  $\rho$  und Temperatur  $T$  gravitativ instabil wird. Um die Jeansmasse abzuschätzen,

## 2.1. PROTOSTELLARER KOLLAPS

---

kann man sich folgender Überlegung (s. Unsöld & Baschek [65]) bedienen: Wenn sich eine homogene Gaskugel vom Radius  $R$ , Dichte  $\rho$  und Masse

$$M = \frac{4\pi}{3}\rho R^3$$

im Gleichgewicht befindet, dann ist nach dem Virialsatz das Verhältnis der doppelten kinetischen Energie  $E_{\text{kin}}$  zur negativen potentiellen Energie  $-E_{\text{pot}}$  gleich Eins:

$$\frac{2E_{\text{kin}}}{-E_{\text{pot}}} = \frac{\frac{3k_{\text{B}}T}{\mu m_{\text{H}}}M}{\frac{3}{5}\frac{GM^2}{R}} = 1.$$

Hieraus erhält man durch Umformen den **Jeansradius**

$$R_J = \frac{1}{5}GM\frac{\mu m_{\text{H}}}{k_{\text{B}}T}$$

bzw. die **Jeansmasse**

$$M_J = \left(\frac{4\pi}{3 \cdot 5^3}\right)^{-1/2} \left(\frac{k_{\text{B}}}{\mu m_{\text{H}}G}\right)^{3/2} T^{3/2} \rho^{-1/2}. \quad (2.1)$$

Falls  $M > M_J$  oder  $R < R_J$  ist, ist kein hydrostatisches Gleichgewicht mehr möglich und die Wolke kollabiert, weil entweder der Innendruck zu klein oder  $-E_{\text{pot}}$  zu groß ist.  $M_J$  hängt nicht nur von der Dichte, sondern auch von der Temperatur ab; deshalb kann durch Abkühlung die Fragmentation einer durch thermischen Druck oder ein Magnetfeld stabilisierten Wolke erneut einsetzen.

### 2.1.2 Typische Skalen

Eine typische Eigenschaft astrophysikalischer Fragestellungen ist neben der Eigengravitation der große Bereich, über den die Werte der physikalischen Größen in Raum und Zeit variieren können (was Auswirkungen auch auf die numerische Behandlung des Problems hat). Meist sind Entwicklungen, die sich auf einer viel längeren Zeitskala als die der kürzesten Phänomene ereignen, von Interesse. Diese beeinflussen aber auch die Langzeitentwicklung, so dass bei der Simulation von Evolutionssequenzen darauf zu achten ist, keine wesentlichen Teile zu überspringen. Diese Tatsache ergibt ein extrem steifes, in der Regel nichtlineares System von Differentialgleichungen, auf dessen numerische Behandlung im Kapitel 4 näher eingegangen wird.

#### Zeitskalen

- *Dynamische Zeitskala*  $t_{\text{dyn}} \approx R_{\text{Kern}}/c_s$ : die Zeit, in der Schallwellen (d.h. Informationen) mit der Geschwindigkeit  $c_s$  durch den Kern der Größe  $R_{\text{Kern}}$  wandern. Für einen hydrostatischen, selbstgravitierenden Protostern ist diese Zeitskala, die *Freie Fallzeit*

$$t_{\text{ff}} = \sqrt{\frac{3\pi}{32G\bar{\rho}}}, \quad (2.2)$$

per Definition die Zeit, in der eine nicht rotierende, nichtmagnetische, drucklose Wolke mit mittlerer Dichte  $\bar{\rho}$  vollständig kollabiert.  $t_{\text{ff}}$  ist nur von  $\bar{\rho}$  abhängig.

- *Thermische oder Kelvin-Helmholtz-Zeitskala:*  $t_{\text{KH}} = |E_{\text{Grav}}|/L$  ( $E_{\text{Grav}}$  Gravitationsenergie,  $L$  Leuchtkraft): Zeit, in der eine Wärmewelle durch den (optisch dicken) Kern propagiert.
- *Diffusionszeitsskala*  $t_{\text{d}}$  ist die Zeit, in der Licht durch eine Schicht der Dicke  $l$  und optischer Tiefe  $\Delta\tau$  läuft:  $t_{\text{d}} = \frac{l}{c} \max(\Delta\tau, 1)$ . Für eine optisch dünne (strahlungsdominierte) Schicht gilt

$$t_{\text{d}} = \frac{l}{c} \frac{3\gamma}{4(\gamma - 1)} \frac{P}{\sigma T^4} \Delta\tau$$

(mit  $\gamma = c_p/c_v$  Verhältnis der spezifischen Wärmen,  $P$  Gasdruck,  $\sigma$  Stefan-Boltzmann-Konstante,  $T$  Temperatur).

- *Akkretionszeitsskala*  $t_{\text{acc}} = M_{\text{Kern}}/\dot{M}$  ( $\dot{M}$  ist die Massenakkretionsrate per Zeiteinheit).

Für einen Stern im Bereich einer Sonnenmasse liegen diese Zeiten typischerweise zwischen  $10^2, \dots, 10^{17}$  s. Werden neben der Strahlungshydrodynamik auch **chemische Prozesse** einbezogen (Abschnitte 3.4 und 3.6), erweitert sich der Bereich noch mehr: chemische Reaktionen sind dichte- und temperaturabhängig und spielen sich auf Zeitskalen  $t_{\text{chem}} = 10^{-9}, \dots, 10^{13}$  s ab.

## Längenskalen

Auch hier liegt eine breite Spannweite der Zahlenwerte vor: Ein protostellarer Kern im Sonnenmassenbereich hat eine typische Größe von etwa  $10^{12}$  cm, die Hülle ist  $10^5$  mal ausgedehnter, während die Akkretionsstoßfront nur einige Meter breit ist. Der Temperaturunterschied zwischen Kern und Hülle beträgt  $10^5 - 10^7$  K. Die Kompression liegt im Bereich von  $1 : 10^{20}$ ; der daraus resultierende Druckunterschied ruft steile Gradienten hervor. Deswegen ist es wichtig, eine numerische Technik zu entwickeln, die in der Lage ist, die Bildung relevanter Strukturen zu erkennen und zu verfolgen.

## 2.2 Strukturgleichungen

In diesem Abschnitt wird eine Übersicht über die Gleichungen, die das Verhalten von Gas und Strahlungsfeld beschreiben, gegeben. Auf die numerische Behandlung des Gleichungssystems wird in Kapitel 4 eingegangen. Die Betrachtung beschränkt sich auf den eindimensionalen, sphärisch symmetrischen Fall. Dies ist zwar eine stark idealisierende Näherung, sie erlaubt dafür aber eine verhältnismäßig vollständige Beschreibung des Sternentstehungsprozesses und damit die Entwicklung realistischerer Modelle. Vernachlässigt werden Rotation und Magnetfelder.

### 2.2.1 Strahlungshydrodynamik

Das dynamische Verhalten von Strahlung und Materie wird durch die Gleichungen der Strahlungshydrodynamik beschrieben, die im wesentlichen physikalische Erhaltungssät-

## 2.2. STRUKTURGLEICHUNGEN

---

ze widerspiegeln. Da in diesem Problem alle Geschwindigkeiten  $u \ll c$  erfüllen, ist nur der nichtrelativistische Grenzfall von Interesse.

### Hydrodynamik

In sphärischer Symmetrie formuliert, lauten die Strukturgleichungen für die Variablen Dichte  $\rho$ , radiale Geschwindigkeit  $u$ , innere Energie  $E_{\text{int}}$  und Masse  $m$  innerhalb einer Kugelschale mit dem Radius  $r$ :

Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho u}{\partial r}. \quad (2.3)$$

Impulserhaltung (Bewegungsgleichung)

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = - \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho u u}{\partial r} + \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{G \rho m}{r} \right) - \frac{4\pi}{c} \rho \kappa_H H + w_Q. \quad (2.4)$$

Energieerhaltung (1. Hauptsatz der Thermodynamik)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E_{\text{int}}}{\partial t} = & - \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 \rho E_{\text{int}} u}{\partial r} + P \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 u}{\partial r} \right) + 4\pi \rho (\kappa_J J - \kappa_S S) + \rho \epsilon_Q. \\ & - \sum E_{\text{ion},i} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \sum E_{\text{diss},i} \frac{\partial n_i}{\partial t}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Eigengravitation (Poissongleichung): Statt das Gravitationspotential zu berechnen, kann die Masse  $m$  innerhalb des Radius  $r$  berechnet werden

$$m = \int_0^r 4\pi \rho r'^2 dr'. \quad (2.6)$$

Über die beiden letzten Terme der Energiegleichung koppelt die chemische an die thermische Entwicklung des Gases.  $E_{\text{ion},i}$  und  $E_{\text{diss},i}$  sind die Ionisations- bzw. Dissoziationsenergie der Spezies  $i$ . Um ein Teilchen der Spezies  $i$  zu ionisieren wird die Ionisationsenergie  $E_{\text{ion},i}$  benötigt, die dem Gas entzogen werden muss. Entsprechend gewinnt das Gas die Bindungsenergie  $E_{\text{diss},i}$  bei der Bildung des Moleküls  $i$ .

$w_Q$  und  $\epsilon_Q$  stehen für den viskosen Impulsübertrag und die viskose Energiedissipation, diese Größen werden im Rahmen der künstlichen Viskosität gebraucht, einer technischen Maßnahme, die zur Behandlung der entstehenden Stoßfronten nötig ist (s. Abschnitt 4.2.2).

### Strahlungstransport

Beschränkt man sich auf sphärische Symmetrie, kann das Strahlungsfeld mit der Intensität  $I_\nu(r, \mu, t)$  am einfachsten durch die Momente der Intensität berücksichtigt werden: das 0. bis 2. Moment der Intensität lauten (mit  $\mu = \cos \theta$ )

$$J_\nu = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_\nu(r, \mu, t) d\mu \quad (2.7)$$

$$H_\nu = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_\nu(r, \mu, t) \mu d\mu \quad (2.8)$$

$$K_\nu = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_\nu(r, \mu, t) \mu^2 d\mu. \quad (2.9)$$

Hiermit können die sog. Momentengleichungen für die radiale spezifische Intensität  $I_\nu(r, \mu, t)$  formuliert werden:

Gleichung für die Strahlungsenergie (0. Moment)

$$\frac{1}{c} \frac{\partial J}{\partial t} = - \left( \frac{1}{c} \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 J u}{r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 H}{r} + \frac{1}{c} K \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 u}{r} \right) + \frac{1}{c} \frac{3K - J}{r} u - \rho(\kappa_J J - \kappa_S S). \quad (2.10)$$

Gleichung für die Strahlungsfluss (1. Moment)

$$\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial t} = - \left( \frac{1}{c} \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 H u}{\partial r} + \frac{\partial K}{\partial r} + \frac{3K - J}{r} + \frac{1}{c} H \frac{1}{r^2} \frac{\partial r^2 u}{\partial r} + \rho \kappa_H H \right). \quad (2.11)$$

Die in obigen Gleichungen auftretenden gewichteten Opazitäten  $\kappa_J$ ,  $\kappa_S$  und  $\kappa_H$  sind folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} \kappa_J &:= \int_0^\infty \kappa_\nu \frac{J_\nu}{J} d\nu \quad \text{mit } J = \int_0^\infty J_\nu d\nu \\ \kappa_S &:= \int_0^\infty \kappa_\nu \frac{S_\nu}{S} d\nu \quad \text{mit } S = \int_0^\infty S_\nu d\nu \\ \kappa_H &:= \int_0^\infty \kappa_\nu \frac{H_\nu}{H} d\nu \quad \text{mit } H = \int_0^\infty H_\nu d\nu. \end{aligned}$$

Man hat also zwei Gleichungen für drei Strahlungsmomente (mittlere spezifische Intensität  $E_{\text{rad}} = \frac{4\pi}{c} J$ , radialer radiativer Fluss  $F_{\text{rad}} = 4\pi H$  und Strahlungsdruck  $P_{\text{rad}} = \frac{4\pi}{c} K$ ), d.h. man braucht zusätzlich eine Beziehung zwischen ihnen, um das System zu schließen.

Dies kann über die Eddingtonnäherung erreicht werden: Unter der Annahme eines fast isotropen Strahlungsfelds am Punkt  $r$  wird die Intensität  $I_\nu(r, \mu)$  bis zur ersten Potenz von  $\theta$  ( $\mu = \cos \theta$ ) entwickelt:

$$I_\nu(r, \mu) = a_\nu(r) + b_\nu(r) \mu. \quad (2.12)$$

Diese Beziehung in die Gleichungen (2.8) bis (2.9) eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned} J_\nu(r) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (a_\nu(r) + b_\nu(r)\mu) \, d\mu = a_\nu(r) \\ H_\nu(r) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (a_\nu(r) + b_\nu(r)\mu) \, \mu \, d\mu = \frac{1}{3} b_\nu(r) \\ K_\nu(r) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (a_\nu(r) + b_\nu(r)\mu) \, \mu^2 \, d\mu = \frac{1}{3} a_\nu(r). \end{aligned}$$

Mit der Definition des Eddingtonfaktors erhält man also

$$f_{Edd} := \frac{J_\nu}{K_\nu} \equiv \frac{1}{3}, \quad (2.13)$$

was für fast isotrope Strahlungsfelder eine akzeptable Approximation ist. Genauer ist es, die frequenzabhängige Strahlungstransportgleichung zu lösen und aus dem Verhältnis der resultierenden Momente den Eddingtonfaktor  $f_{Edd}$  zu bestimmen.

In der hier vorliegenden Arbeit wurde der Eddingtonfaktor für den grauen (d.h. frequenzunabhängigen) Fall numerisch mit Hilfe der sog.  $pz$ -Methode berechnet. Die Verfahrensweise basiert auf einer Arbeit von Yorke [71] und ist in Anhang A näher beschrieben.

## 2.3 Materialfunktionen und Zustandsgleichungen

Neben den Strukturvariablen  $(\rho, u, m, E_{\text{int}}, J, H)$  treten im System der Strukturgleichungen weitere Größen auf, die vom Strahlungsfeld, dem thermodynamischen Zustand des Systems und der chemischen Zusammensetzung des Objekts abhängen.

### 2.3.1 Opazität

Zwischen Strahlung und Materie findet stets ein Energie- und Impulsaustausch statt. Dieser Tatsache wird in den Gleichungen der Strahlungshydrodynamik durch Kopplungsterme Rechnung getragen, die mit unterschiedlicher Gewichtung der frequenzabhängigen Opazität  $\kappa_\nu$  in die Gleichungen eingehen: Für den Strahlungsfluss gilt z.B.  $\kappa_H := \int_0^\infty \kappa_\nu \frac{H_\nu}{H} d\nu$  mit  $H = \int_0^\infty H_\nu d\nu$ ; entsprechend wird bei den anderen Momenten und der Quellfunktion  $S$  bzw.  $S_\nu$  vorgegangen. Das Strahlungsfeld muss a priori bekannt sein, um die Integration ausführen zu können. Diese Prozedur ist sehr aufwendig und rechenzeitintensiv. Deswegen werden die gewichteten Opazitäten oft durch die Planck- bzw. Rosselandmittel ersetzt, was den Vorteil hat, dass die Integration einmalig und im Voraus durchgeführt werden kann.

Häufig wird nur das Rosselandmittel  $\kappa_R$  der Opazität benutzt, da es hierfür tabellierte Daten gibt (OPAL [25], OP [4]) und  $\kappa_{H,J,S} = \kappa_R$  gesetzt. Besser ist es, die physikalisch geeigneteren Approximationen  $\kappa_H = \kappa_R$  und  $\kappa_{J,S} = \kappa_P$  zu benutzen.

Für strahlungshydrodynamische Rechnungen ist die Opazität von fundamentaler Bedeutung, weil die Opazität der Kopplungsfaktor zwischen Strahlungsfeld und Materie ist. Die Berechnung der notwendigen Daten (Energieniveaus, Wirkungsquerschnitte usw.)

zur Bestimmung der Opazität ist sehr aufwendig, da alle Stoß- und Strahlungsübergänge sämtlicher vorhandenen Spezies über einen möglichst großen Temperatur- und Dichtebereich bekannt sein müssen. Es gibt für diverse Gasmischungen und einen weiten Bereich von Metallizitäten tabellierte Daten für  $\kappa_R$ , z.B. von OPAL [24] oder dem Opacity Project OP [4].

Die Daten von OPAL und OP gelten aber für Bedingungen, wie sie z.B. in Sternatmosphären vorherrschen, sind also für die Beschreibung der kalten, dünnen primordialen Gasmischung ungeeignet. Für die primordiale Gasmischung, vor allem bei niedriger Temperatur und Dichte, ist die Datenlage spärlich; es gibt tabellierte Daten von Lenzuni et al. [31] für  $\kappa_R$  und  $\kappa_P$  im Bereich

$$\begin{aligned} 1000 &\leq T \text{ [K]} \leq 7000 \\ 10^{-12} &\leq \rho \text{ [g cm}^{-3}\text{]} \leq 0,5. \end{aligned}$$

Für den bei protostellaren Kollapsrechnungen zu erwartenden Dichte- und Temperaturbereich ist dieses Wertintervall zu klein, eine Extrapolation heikel.

In neueren Arbeiten von Mayer [35] wurde die Opazität ( $\kappa_R$  und  $\kappa_P$ ) mit neueren Daten eigens für die primordiale Gasmischung (in Abhängigkeit von chemischer Zusammensetzung, Dichte und Temperatur) berechnet.

Die Opazitäten von Mayer [35] wurden ursprünglich zur Modellierung primordialer Akkretionsscheiben berechnet. Sie decken einen Temperatur- und Dichtebereich von  $60 \leq T \text{ [K]} \leq 40 \cdot 10^3$  bzw.  $10^{-16} \leq \rho \text{ [g cm}^{-3}\text{]} \leq 10^{-2}$  ab. In den Rechnungen wurde stets von chemischem und lokalem thermischen Gleichgewicht als Grundannahme ausgegangen.

Ein interessanter Befund war, dass Lithium trotz der sehr geringen Häufigkeit ( $f_{\text{Li}} \approx 10^{-10}$ ) eine wichtige Rolle bei verhältnismäßig niedrigen Temperaturen ( $1000 \leq T \text{ [K]} \leq 3000$ ) spielt, da es sehr früh ionisiert. Die dadurch bereitgestellten freien Elektronen beeinflussen die Häufigkeit der  $\text{H}^-$ - und der  $\text{H}_3^+$ -Ionen, erstere wird erhöht, letztere herabgesetzt.

Die  $\text{H}_2$ -Absorption spielt bei Temperaturen unter 500 K keine nennenswerte Rolle, weil der niedrigste Übergang des  $\text{H}_2$ -Moleküls bei 511 K liegt (siehe Abschnitt 3.5). In diesem Temperaturbereich (genauer bis ca. 400 K) wird die Opazität von LiH dominiert; HD liefert nur unwesentliche Beiträge. Bei Temperaturen über 1250 K kühlen Li-Atome besser als  $\text{H}_2$ , sofern chemisches Gleichgewicht vorausgesetzt wird. Da aufgrund fehlender Oberflächen (Staub)  $\text{H}_2$  sich im primordialen Gas nur in der Gasphase bilden kann (bei niedrigen Dichten sehr ineffizient über  $\text{H}_2^+$  und  $\text{H}^-$ , erst bei höheren Dichten ab  $n \geq 10^8 \text{ cm}^{-3}$  über Dreiteilchenprozesse, siehe Abschnitt 3.4.2), ist molekularer Wasserstoff unterhäufig, wodurch die Kühlung durch Li-Atome selbst bei Temperaturen um 600 K dominieren kann.

Dies bedeutet für die Modellrechnungen der vorliegenden Arbeit, in der angenommen wurde, dass die Gasmischung ausschließlich aus Wasserstoff besteht, dass die Kühlung des Gases eher unterschätzt wurde.

Die zur Berechnung der primordialen Opazität berücksichtigten Absorptionsmechanismen waren folgende:

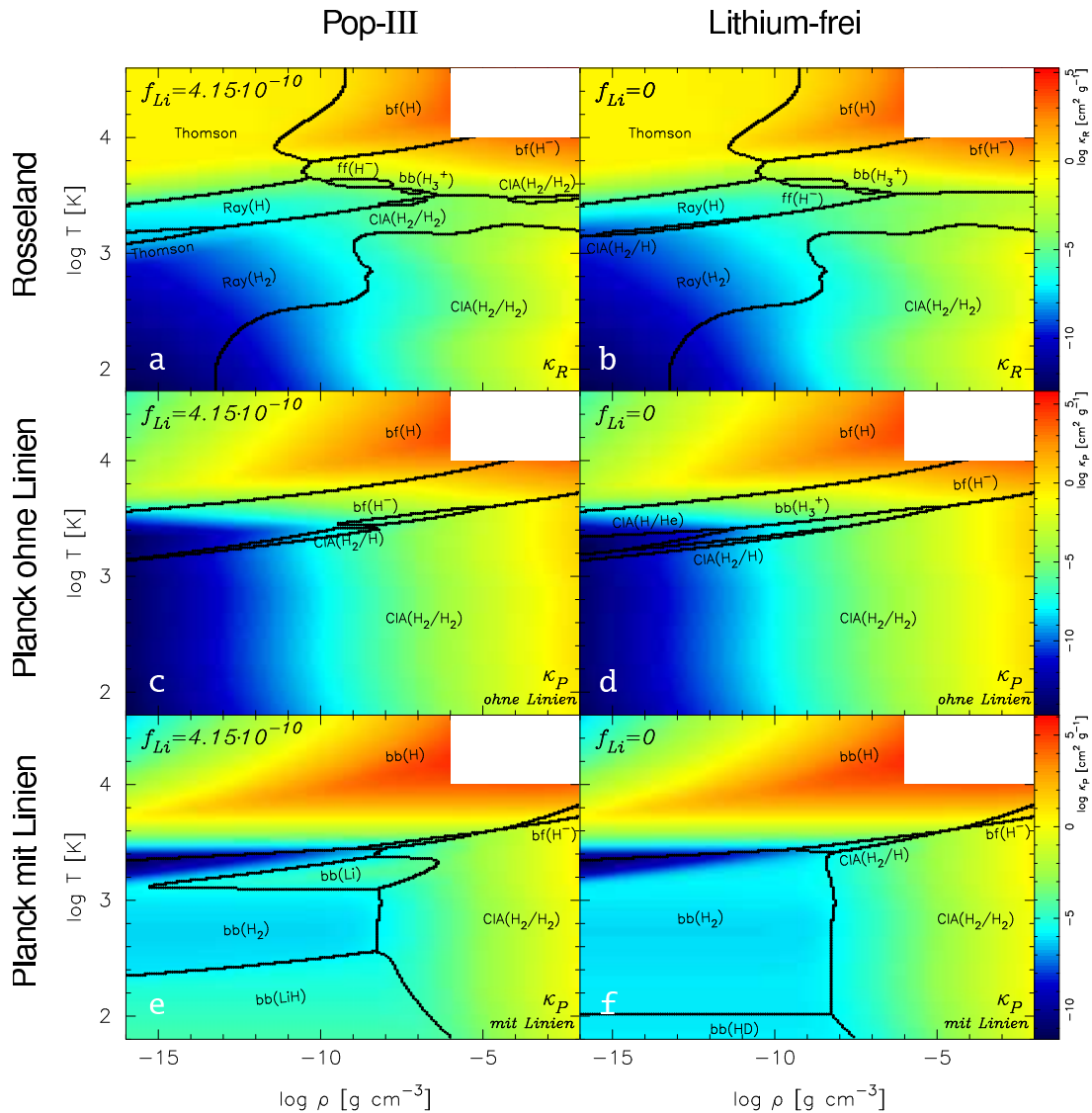


Abbildung 2.1: PopIII-Opazitäten aus Mayer [35]. Die Abbildungen zeigen auf der rechten Spalte die Opazitäten für lithiumfreies Gas, auf der linken die für die PopIII-Gasmischung. Von oben nach unten sind das Rosselandmittel, das Planckmittel ohne und mit Linien eingezeichnet, wobei die jeweils dominierenden Absorptionsmechanismen eingetragen sind. Die Werte gelten unter der Annahme chemischen Gleichgewichts. Die weißen Bereiche stehen für Gebiete, für die keine Opazitäten berechnet wurden.

- Thomsonstreuung.
- Rayleighstreuung.
- Frei-Frei-Übergänge.
- Gebunden-Frei-Übergänge: Photoionisation und -dissoziation.
- Gebunden-Gebunden-Übergänge: Sind insbesondere bei  $H_3^+$  wichtig, da es als häu-



figstes positiv geladenenes molekulares Ion die Häufigkeiten anderer Spezies beeinflusst (Ladungserhaltung).

- Kollisionsinduzierte Absorption (CIA): Ist im primordialen Gas besonders wichtig, weil  $\text{H}_2$ , bei Abwesenheit von Staub der wichtigste Kühler, eigentlich nur über ineffiziente Quadrupolübergänge absorbieren kann (Abschnitt 3.5). Durch CIA können deutlich effizientere Dipolübergänge hervorgerufen werden, die die Absorption erheblich steigern können. Dieser Effekt ist bei hohen Dichten wichtiger, weil dann die Stöße häufiger sind.

Es gibt vier Bereiche, bei denen unterschiedliche Prozesse dominant zum Rosselandmittel der Opazität beitragen, diese werden in der Temperatur bei  $T \approx 3000$  K und in der Dichte bei  $\rho \approx 10^{-9}$  g cm $^{-3}$  voneinander getrennt. Bei niedriger Dichte dominiert Streuung, während bei hoher Dichte der Übergang von Absorption durch gebunden-frei-Übergängen zu CIA stattfindet. Bei  $T \approx 3000$  K findet sich ein sehr starker Temperaturgradient im Rosselandmittel. Bei niedriger Dichte wird dieser durch den scharfen Übergang von  $\text{H}_2$  zu H und  $e^-$  (Rayleighstreuung an  $\text{H}_2$  und H bzw. Thomsonstreuung) verursacht. Bei hoher Dichte sind es die  $\text{H}^-$  und gebunden-frei-Übergänge von H.

Bei der Bestimmung des Planckmittels der Opazität kann zwischen Prozessen mit und ohne Linienabsorption unterschieden werden.

Wird die Linienabsorption vernachlässigt, kann zwischen drei Gebieten unterschieden werden, die jeweils durch Atome, Moleküle oder Ionen dominiert werden. Im von Ionen dominierten Gebiet trägt hauptsächlich CIA ( $\text{H}_2 - \text{H}_2$ ) zur Opazität bei, im atomaren ist es die Absorption durch gebunden-frei-Übergänge von  $\text{H}^-$ , während es im ionendominierten Gebiet die gebunden-frei-Übergänge von H sind. Im Übergangsbereich zwischen molekularem und atomarem Gebiet hat die Opazität ein lokales Minimum, das durch die rasche  $\text{H}_2$ -Dissoziation bei verzögertem Aufbau von  $\text{H}^-$  verursacht wird. Bei niedrigen Temperaturen und Dichten fällt die Opazität unter alle Grenzen, weil es keine Absorptionsmechanismen gibt, die zur Opazität beitragen würden.

Wird nun die Linienabsorption mit berücksichtigt, ändert sich obiges Bild deutlich. Bei niedrigen Temperaturen und Dichten ergibt sich durch die Linienabsorption ein Plateau in der Opazität, bei höheren Dichten dominiert ebenfalls die CIA, die proportional zur Dichte ist. Bei hoher Temperatur trägt die Absorption durch gebunden-frei-Übergänge von H am meisten zur Opazität bei.

Die in jedem Bereich dominierenden Absorptionsmechanismen sind Abbildung 2.1, die die Opazitäten für die PopIII-Gasmischung mit und ohne Lithium zeigt (Rosseland- und Planckmittel, letzteres mit und ohne Linien), eingetragen.

Von den Daten zur Berechnung der Opazität wird folgender Dichte- und Temperaturbereich abgedeckt

$$\begin{aligned} 60 &\leq T \text{ [K]} \leq 40 \cdot 10^3 \\ 10^{-16} &\leq \rho \text{ [g cm}^{-3}\text{]} \leq 10^{-2}. \end{aligned}$$

Für Temperaturen zwischen  $10^{4,6}$  K und  $10^{10}$  K wird aus den Werten von Eldridge & Tout [16] interpoliert. Im Einzelnen wird folgendermaßen vorgegangen:

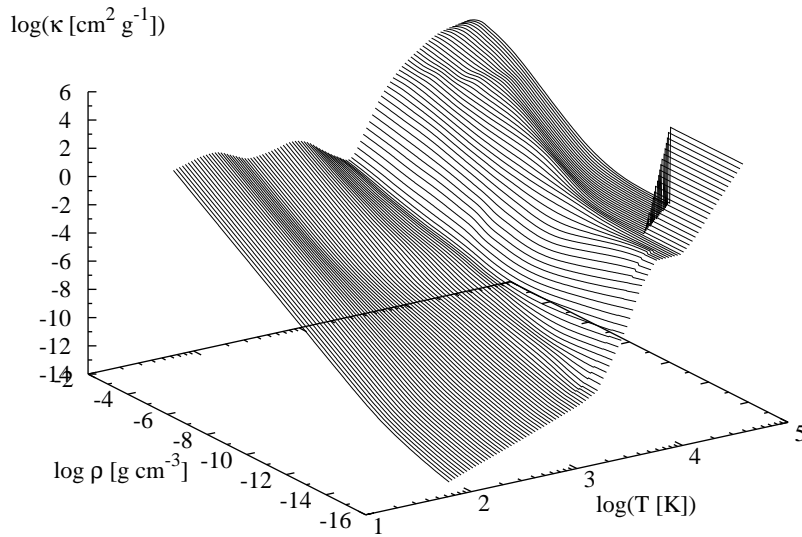


Abbildung 2.2: Rosselandmittel der Opazität für die primordiale Gasmischung nach Mayer [35].

- Das Rosselandmittel der Opazität wird für variable Werte von  $\rho$  und  $T$  aus den tabellierten Werten interpoliert, wobei  $\kappa_R$  unter der Annahme berechnet wird, dass sich das Gas ( $Z = 0$ ) für den gegebenen  $\rho$ - $T$ -Wert im chemischen Gleichgewicht befindet.
- Das Planckmittel der Opazität kann entweder analog zu  $\kappa_R$  für eine chemische Gleichgewichtszusammensetzung oder in Abhängigkeit von der aktuellen chemischen Zusammensetzung bestimmt werden, die aus der Modellrechnungen entnommen wird. Diese Vorgehensweise ist für das Planckmittel im Gegensatz zum Rosselandmittel möglich, weil es sich hier um einen linearen Zusammenhang handelt, der es erlaubt die Beiträge der einzelnen Prozesse getrennt zu berechnen und anschließend aufzusummieren. Ab Temperaturen  $T > 10^{4,6}$  wird  $\kappa_P = \kappa_R$  gesetzt.

Bei den Interpolationsroutinen handelt es sich um kubische Splines. Auf diese Weise ist sichergestellt, dass nicht nur die interpolierten Größen (die Opazitätswerte), sondern auch deren Ableitungen stetig sind.

Die Opazität des primordialen Gases kann Werte annehmen, die einen Bereich von etwa 20 Größenordnungen zwischen  $10^{-14} \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  und  $10^6 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  im Falle von  $\kappa_R$  bzw.  $10^{-12} \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  und  $10^8 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  bei  $\kappa_P$ , überspannen, wie in den Abbildungen 2.3 und 2.3 zu sehen ist.

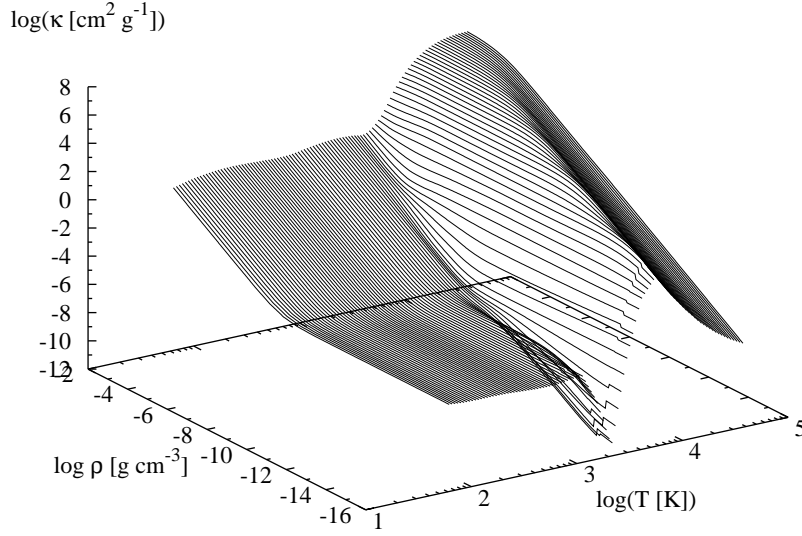


Abbildung 2.3: Planckmittel der Opazität für die primordiale Gasmischung nach Mayer [35].

Für weitergehende Einzelheiten sei auf die Dissertation von Mayer [35] verwiesen, in der sämtliche berücksichtigte Prozesse sowie die genaue Vorgehensweise bei der Berechnung der Opazität detailliert beschrieben wird. Ein Grund für die unterschiedliche Entwicklung von Pop III- und Pop I-Sternen ist die Art und Weise, in der sie die bei der Kontraktion gebildete Kompressionswärme abstrahlen.

Die Opazität für die Pop I-Gasmischung wurde mittels einer analytischen Fitformel (Gleichung (2.14)) für das Rosselandmittel von Gail<sup>1</sup> genähert und  $\kappa_R = \kappa_P = \kappa_{\text{PopI}}(\rho, T)$  gesetzt. Modelle, die mit diesen Opazitätswerten gerechnet werden, können also mit Einschränkungen als Testmodelle für Pop I-Protosterne gesehen werden. Vor allem aber ermöglicht dies einen Vergleich der Entwicklungen von Protosterne, die auf unterschiedliche Weise mit dem Strahlungsfeld wechselwirken.

$$\kappa^{-2} = \frac{1}{\kappa_{\text{ice}}^2} + \frac{T_0^{10}}{T_0^{10} + T^{10}} \cdot \frac{1}{\kappa_{\text{ice, ev}}^2 + \kappa_{\text{dust, abs}}^2} \quad (2.14)$$

$$+ \frac{1}{\kappa_{\text{dust, ev}}^2 + \kappa_{\text{mol}}^2 + \kappa_{\text{H}^-}^2} + \frac{1}{\kappa_{\text{atom}}^2 + \kappa_{\text{e}^-}^2}$$

mit

$$\begin{aligned} T_0 &= 3000 \\ \kappa_{\text{ice}} &= 2 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 & \kappa_{\text{mol}} &= 10^{-8} \cdot \rho^{2/3} \cdot T^3 \\ \kappa_{\text{ice, ev}} &= 10^{16} \cdot T^{-7} & \kappa_{\text{H}^-} &= 10^{-36} \cdot \rho^{1/3} \cdot T^{10} \\ \kappa_{\text{dust, abs}} &= 0.1 \cdot T^{0.5} & \kappa_{\text{atom}} &= 1.5 \cdot 10^{20} \cdot \rho \cdot T^{-5/2} \\ \kappa_{\text{dust, ev}} &= 2 \cdot 10^{81} \cdot \rho \cdot T^{-24} & \kappa_{\text{e}^-} &= 0.348 \end{aligned}$$

<sup>1</sup>persönliche Mitteilung.

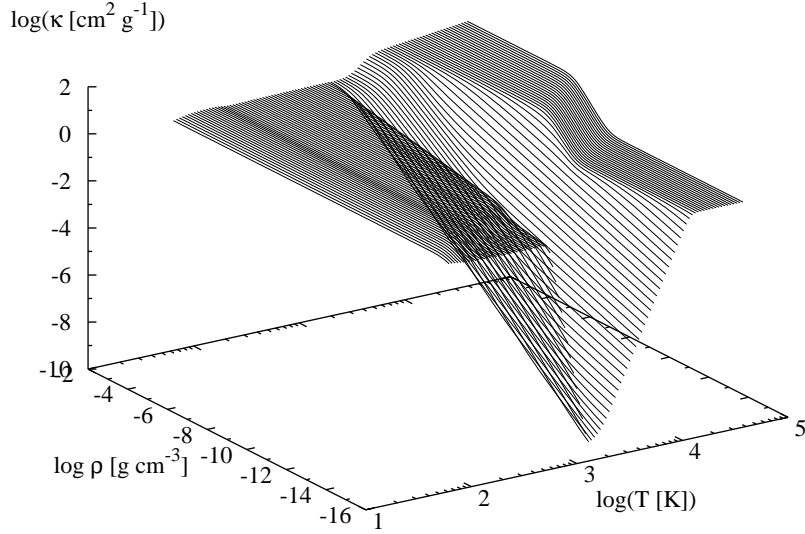


Abbildung 2.4: Rosselandmittel der Opazität für Pop I- Gasmischung nach Gleichung (2.14).

Die numerischen Koeffizienten entsprechen den Koeffizienten von Bell & Lin [7]. Sie sind nach dem jeweils im entsprechenden Temperaturbereich dominanten Prozess benannt und nach steigender Temperatur geordnet, wobei oben links die niedrigste, unten rechts die höchste Temperatur herrscht.

### 2.3.2 Zustandsgleichung

Die Zustandsgleichung setzt Druck, Temperatur und Dichte zueinander in Beziehung. Für ein ideales Gas gilt:

$$P = \frac{k_B T}{m_H \bar{\mu}} \rho = N_{\text{tot}} k_B T. \quad (2.15)$$

$\bar{\mu}$  ist das mittlere Molekulargewicht, das mit

$$N_{\text{tot}} = \sum_i n_i \quad \text{Gesamtanzahl der Teilchen (einschließlich Elektronen)}$$

$$C_i = \frac{n_i}{N_{\text{tot}}} \quad \text{Konzentration der Spezies } i$$

$$Z_{\text{eff},i} \quad \text{effektive Anzahl Elektronen}$$

$$A_i \quad \text{Atomgewicht der Spezies } i$$

folgendermaßen geschrieben werden kann:

$$\bar{\mu} = \left( \sum_i \frac{C_i (1 + Z_{\text{eff},i})}{A_i} \right)^{-1}. \quad (2.16)$$

Laut Saumon et al. [52] ist die Annahme eines idealen Gases gerechtfertigt, sofern die Dichte  $10^{-6} \text{g cm}^{-3}$  nicht wesentlich überschreitet; bei höheren Werten treten nicht-ideale Effekte, wie z.B. Druckionisation auf, die bei der Berechnung des Drucks nicht vernachlässigt werden sollten. Saumon et al. [52] stellen tabellierte Daten der Zustandsgleichung für ein reines Wasserstoff- und ein reines Heliumgas zur Verfügung, aus denen der Druck für

$$\begin{aligned} 125 &\leq T \text{ [K]} \leq 1,15 \cdot 10^6 \\ 10^{-6} &\leq \rho \text{ [g cm}^{-3}\text{]} \leq 5623 \end{aligned}$$

interpoliert werden kann. Auf diese Weise würden zwar die oben genannten Effekte, insbesondere die Druckionisation von  $\text{H}_2$ , bei der Bestimmung des Drucks berücksichtigt. In den chemischen Ratengleichungen (siehe Abschnitt 3.6) ist diese aber nicht enthalten, was zu einer Inkonsistenz in den Modellen führen würde<sup>2</sup>. Aus diesem Grund wurde auf die Implementierung einer erweiterten Zustandsgleichung verzichtet.

Aus Sternentwicklungsrechnungen ist bekannt, dass der Strahlungsdruck erst ab hohen Massen eine Rolle spielt. In den Modellen, die in der vorliegenden Arbeit gerechnet werden, erreicht die Masse der protostellaren Kerne bis zu dem Zeitpunkt, an dem die Modellrechnung abgebrochen wird, nur Werte von deutlich unter einer Sonnenmasse, sodass die Vernachlässigung des Strahlungsdrucks gerechtfertigt ist.

### Innere Energie und Temperatur

Die innere Energie pro Masseneinheit  $E_{\text{int}}$  setzt sich aus der Summe der thermischen und der chemischen Energie ( $U_{\text{th}}$  bzw.  $U_{\text{chem}}$ ) zusammen; dabei trägt jedes Teilchen mit  $\frac{1}{2}k_{\text{B}}T$  pro Freiheitsgrad  $\text{ndf}_i$  zum thermischen und mit seiner Ionisations- bzw. Dissoziationsenergie zum chemischen Energieinhalt bei

$$U_{\text{th}} = \sum_i \frac{1}{\gamma_i - 1} n_i k_{\text{B}} T \quad (2.17)$$

$$E_{\text{int}} = \frac{U_{\text{th}}}{\rho} \quad (2.18)$$

mit

$$\frac{1}{\gamma_i - 1} = \begin{cases} \frac{5}{2} + \left[ x^2 \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} \right], & x \equiv \frac{6100\text{K}}{T} \text{ für } \text{H}_2 \\ \frac{\text{ndf}_i}{2} & \text{für die restlichen Spezies.} \end{cases} \quad (2.19)$$

Durch obige Formulierung mit dem Adiabatenindex  $\gamma_i$  werden durch den Zusatzterm die Vibrationsfreiheitsgrade von  $\text{H}_2$  nach Omukai & Nishi [42] berücksichtigt.

<sup>2</sup> Alternativ könnte die  $\text{H}_2$ -Häufigkeit aus den Tabellen interpoliert werden, was aber nur im Gültigkeitsbereich der Tabellen möglich wäre. Die Zustandsgleichung hängt auch von der chemischen Zusammensetzung des Gases ab. In Saumon et al. [52] wird die chemische Gleichgewichtszusammensetzung für einen gegebenen  $(\rho, T)$ -Punkt durch Minimierung der spezifischen freien Helmholtz-Energie berechnet.

### 2.3. MATERIALFUNKTIONEN UND ZUSTANDSGLEICHUNGEN

---

Die spezifische innere Energie ist also eine Funktion der (Teilchen-)Dichten und Temperatur, aus der die Temperatur (z.B. mittels Newton-Raphson-Iteration) berechnet werden kann:

$$T_{\text{neu}} = T_{\text{alt}} - \left( \frac{E_{\text{int}}(T, \rho, n_i) - E_{\text{int}}}{dE_{\text{int}}(T, \rho, n_i)/dT} \right). \quad (2.20)$$

Hier ist  $E_{\text{int}}(T, \rho, n)$  die nach Gleichung (2.18) berechnete innere Energie pro Masseneinheit und  $E_{\text{int}}$  der aktuelle (während der Iteration konstant gehaltene) Wert der inneren Energie pro Masseneinheit, der aus der Energiegleichung (2.5) des Gesamtsystems stammt.

## Kapitel 3

# Chemie im frühen Universum

### 3.1 Urknall und primordiale Nukleosynthese

Kosmologische Fragestellungen, wie die Entwicklung des Universums unmittelbar nach dem Urknall oder die Entstehung großräumiger Strukturen, sind nicht Gegenstand dieser Arbeit, weshalb nur ein kurzer Überblick auf wichtige Theorien und Entdeckungen, die zur Entwicklung der jetzigen Vorstellungen zur Entstehung der leichten Elemente nach dem Big Bang beigetragen haben, gegeben werden soll.

Als experimenteller Nachweis der Expansion des Universums gilt die 1929 von Hubble gemachte Beobachtung der Beziehung zwischen der Rotverschiebung von Galaxien und deren Entfernung zur Erde; als Dopplereffekt interpretiert bedeutet dies: Die gemessene Radialgeschwindigkeit  $v_r$  eines Objekts ist proportional zu deren Entfernung  $r$ :

$$v_r = Hr, \tag{3.1}$$

wobei  $H$  die Hubblekonstante ist, dessen Wert laut Spergel et al. [56] bei  $H_0 = 72 \pm 3(\text{stat.}) \pm 7(\text{syst.}) \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$  liegt. Ein relativistisches Modell eines expandierenden Weltalls wurde vor Hubbles Entdeckung Anfang der 1920er Jahre von Friedmann aus der Lösung der Einsteingleichungen unter Voraussetzung des Weltpostulats (Weltall homogen und isotrop) aufgestellt. Darin ist die Expansion zeitabhängig und wird durch nur einen Parameter, den Skalenfaktor  $R(t)$ , der mit der Raumkrümmung zusammenhängt, beschrieben.

In den 1940er Jahren haben Gamov und seine Mitarbeiter die Bedingungen bei der Nukleosynthese von Elementen untersucht. Sie gingen der Frage nach, ob es möglich wäre, die chemischen Elemente in heute beobachteter Häufigkeit schrittweise aus Protonen und Neutronen im heißen Urgas (unter Bedingungen ähnlich denen in heißen Sternen) zu synthetisieren. Sie kamen zu dem Ergebnis, dass die Reaktionskette bei Helium abbricht, schwerere Elemente also nicht in einem Urfeuerball entstanden sein konnten. 1968 wurden von Wagoner erste Rechnungen zur Big Bang Nukleosynthese (BBN) veröffentlicht, die 1973 von ihm aktualisiert wurden (Wagoner [68]); aktuellere und umfangreichere Daten wurden von Vangioni-Flam et al. in der NACRE-Kompilation [66] publiziert.

Der bedeutendere Teil von Gamovs Arbeit liegt in der Vorhersage, dass die Strahlung des damals expandierenden Universums heute noch nachweisbar sein müsste. Der Nachweis

## 3.2. PRIMORDIALE HÄUFIGKEITEN

---

gelang 1965 durch die zufällige Entdeckung der kosmischen Mikrowellenhintergrundstrahlung durch Penzias & Wilson [45]. Ihre Messungen wurden 1979 von Woody & Richards [69] durch Messungen des Strahlungsfeld im gesamten zugänglichen Wellenlängenbereich ergänzt, die eine Plancksche Strahlungskurve eines schwarzen Körpers mit  $T = 3\text{K}$  ergaben. Die Strahlung erwies sich als praktisch isotrop und unpolarisiert, ein Beweis dafür, dass das Universum, im Einklang mit dem Friedmannmodell, von einem Zustand hoher Temperatur und Materiedichte ausging.

Messungen des COBE-Satelliten (ab 1989) ergaben für die kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung (CMB) eine Temperatur von

$$T_{CMB} = 2,73 \pm 0,01\text{K} \text{ (aus den Messdaten abgeleitet)}$$

$$T_{CMB} = 2,728 \pm 0,002\text{K} \text{ (Absolutmessungen im FIR).}$$

Die relative Intensität der Strahlung stimmt innerhalb von  $10^{-4}$  mit der Planckkurve überein, die Polarisation liegt unterhalb von  $10^{-5}$ .

## 3.2 Primordiale Häufigkeiten

Die Kenntnis der primordialen Häufigkeiten ist erforderlich, da diese als Anfangswerte für die Modellierung der protostellaren Phase der benötigt werden.

### 3.2.1 Vorhersage primordialer Häufigkeiten aus SBBN-Rechnungen

Die Umkehrung der Expansion des Universums führt zu dem Schluss, dass das Universum kurz nach dem Urknall ein primordialer Reaktor gewesen sein muss, in dem in den ersten Minuten nach dem Big Bang die leichten Elemente synthetisiert wurden.

Die Grundannahmen der Standard Big Bang Nukleosynthese (SBBN) sind folgende: Ein homogenes Universum, isotrope Expansion, Teilcheninhalt gemäß dem Standardmodell der Teilchenphysik (d.h. insbesondere drei Arten leichter (Masse im MeV-Bereich) oder masseloser Neutrinos<sup>1</sup>).

Die Häufigkeiten der durch die primordiale Nukleosynthese erzeugten Nuklide ist in dieser Theorie durch einen freien Parameter, dem Nukleon zu Photon-Verhältnis  $\eta$  (oft  $\eta_{10} \equiv 10^{10}\eta$ ), darstellbar.  $\eta$  muss durch weitere Annahmen oder Beobachtungen bestimmt oder zumindest eingeschränkt werden. Bei Beobachtungen ist es in diesem Zusammenhang oft zweckmäßig, statt mit  $\eta$  mit  $\Omega_b h^2$  ( $h$  ist hierbei der Hubbleparameter in Einheiten von  $100 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$ ) als freiem Parameter zu arbeiten.

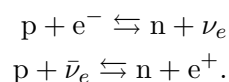
Während der ersten Zehntelsekunden nach dem Urknall waren Dichte und mittlere Energie der stoßenden Teilchen so groß, dass die Reaktionen der schwachen Wechselwirkung so schnell abliefen, dass Neutrinos im thermischen Gleichgewicht mit  $e^\pm$ -Paaren und den Photonen der kosmischen Hintergrundstrahlung waren ( $\nu + \bar{\nu} \leftrightarrow e^+ + e^- \leftrightarrow \gamma + \gamma$ ).

---

<sup>1</sup>An diesem Punkt knüpfen andere Varianten der Big Bang Nukleosynthese-Modelle an, die u.a. zum Ziel haben, die Richtigkeit des Standardmodells der Teilchenphysik zu testen. Sog. Neue Physik würde sich natürlich auch auf die Vorhersagen primordialer Häufigkeiten auswirken. Auf diese Art von Fragestellungen soll hier nicht näher eingegangen werden.

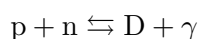


Einige Sekundenbruchteile später führte die Expansion des Universums zur Entkoppelung der Neutrinos von den Photonen der kosmischen Hintergrundstrahlung, so dass sie bei der Umwandlung von Protonen in Neutronen (und umgekehrt) eine Rolle spielen konnten. Die Energiedichte war aber immer noch so hoch, dass die Anzahl von Protonen und Neutronen durch die schwache Wechselwirkung im Gleichgewicht gehalten wurde:



Nach einigen Sekunden froh das n/p-Verhältnis aus, und nahm anschließend wegen des Neutronenzerfalls ( $\tau_n = 887,6\text{ s}$ ) weiter ab.

Die ganze Zeit über wurde Deuterium über die Reaktion



produziert. D ist nur schwach gebunden, so dass die stärker gebundenen Nuklide  $^3\text{H}$  und  $^3\text{He}$  erst gebildet werden konnten, als die Energie des Strahlungsfeldes unter die Photodissoziationsschwelle von D gesunken war.

Die Nukleosynthese setzte ein, als das Universum wenige Minuten alt war, und die Temperatur unter den kritischen Wert von 80 keV fiel, womit der D-Photodissoziationsflaschenhals überwunden wurde und D zu  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}$ , und  $^4\text{He}$  verbrannt wurde, dies umso schneller, je höher die Nukleondichte war, d.h. die primordialen D- und  $^3\text{He}$ -Häufigkeiten wurden einerseits durch einen Wettlauf zwischen den Kernreaktionen (abhängig von der Dichte der Reaktionspartner) und der Expansion des Universums andererseits festgelegt.

Es gibt keinen stabilen Kern mit der Massenzahl  $A = 5$ . Durch diese Lücke wird der Weg zu Kernen schwerer als  $^4\text{He}$  erschwert, da diese dann nur über Reaktionen mit Kernen, die aus zwei oder mehreren Nukleonen bestehen, gebildet werden können. Die Häufigkeiten von D,  $^3\text{H}$ ,  $^3\text{He}$  waren stets gering und Reaktionen wurden durch die hohe Coulombschwelle (insbesondere zwischen  $^3\text{He} + ^3\text{He}$  und  $^4\text{He} + ^4\text{He}$ ) zusätzlich unterdrückt. Dies hatte zur Folge, dass kaum Kerne mit  $A > 5$  gebildet wurden und fast alles  $^4\text{He}$  überlebt hat;  $^7\text{Li}$  ist der einzige primordial erzeugte Kern mit  $A > 5$ , der in beobachtbarer Häufigkeit vorkommt.

Auch bei  $A = 8$  gibt es keinen stabilen Kern; diese Lücke hat den Aufbau schwererer Nuklide mit  $A > 8$  verhindert.

Etwa 1000 Sekunden nach dem Urknall ( $T \sim 30\text{ keV}$ ) kam es zum schlagartigen Abbruch der primordialen Nukleosynthese, da das Weltall durch Expansion bereits zu kalt und die Coulombbarriere für geladene Teilchen zu hoch geworden war, d.h. dass nach dem Urknall nur die Nuklide D,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$  und Li synthetisiert wurden.

Da alle Dichten mit der Expansion abnehmen, ist es zweckmäßig, die Nukleondichte durch  $\eta$ , das Verhältnis der Nukleonen zu Photonen (gemessen nach der  $e^\pm$ -Anihilation) zu quantifizieren; daher die Wahl von  $\eta$  als freiem Parameter in der SBBN-Theorie. Durch die heutige Temperatur der Hintergrundstrahlung wird die Dichte der CMB-Photonen festgelegt; mit der Bestimmung der heutigen Massendichte in Nukleonen (Baryonen) ist  $\eta$  bekannt.

### 3.2. PRIMORDIALE HÄUFIGKEITEN

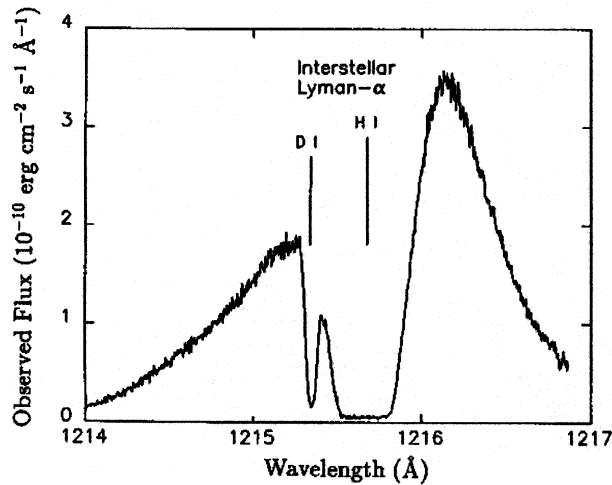


Abbildung 3.1: Spektrum des 12,5 pc entfernten spektroskopischen Doppelsternsystems Capella in der 1216 Å-Region (aus Linsky et al. [33]). Die Abbildung zeigt ein Profil, dass aus einer breiten Ly $\alpha$ -Emissionslinie besteht, die durch die Chromosphären beider Sterne sowie Absorption durch das interstellare Medium erzeugt werden. Gut zu sehen ist die bezüglich Wasserstoff um  $-0,33$  Å verschobene Deuteriumlinie

Der in diesem Zusammenhang interessante  $\eta$ -Bereich liegt zwischen  $\eta = 1$  und  $\eta = 10$ . Heute sind die meisten relevanten Kernreaktionsraten für die Synthese leichter Elemente für die Synthese leichter Elemente bei Energien im Bereich der thermischen Energie zur Zeit der primordialen Nukleosynthese ausreichend genau gemessen, so dass die theoretischen Unsicherheiten (unten ist der  $1\sigma$ -Bereich angegeben) der durch BBN-vorhergesagten Häufigkeiten verhältnismäßig klein sind:

$$\begin{aligned} \text{D, } ^3\text{He} &: 8 - 10 \% \\ Y_p &: 0,2 - 0,5 \% \\ \text{Li} &: 12 - 21 \%. \end{aligned}$$

#### 3.2.2 Primordiale Häufigkeiten aus Beobachtungen

Während die SBBN-Theorie Häufigkeiten für eine Vielzahl von Isotopen vorhersagt, ist es nur möglich, diese für H, D,  $^6\text{Li}$  und  $^7\text{Li}$  zu messen.

Bei der Bestätigung der theoretischen Vorhersagen durch Beobachtungen ist es von großem Vorteil, dass für jede Spezies andere Methoden und astronomische Gebiete herangezogen werden können, wodurch eine Korrelation der Messfehler weitgehend ausgeschlossen werden kann.

#### Deuterium

D wird in Sternen über die Reaktion  $\text{D} + \text{p} \rightarrow ^3\text{He} + \gamma$  zu He verbrannt. Da es in Sternen keine Deuteriumquelle gibt, muss der heute gemessene Wert eine Untergrenze für den primordialen Wert darstellen. Die D/H-Häufigkeit kann im lokalen interstellaren

Medium aus der relativen Stärke der isotopisch getrennten Lymanabsorptionslinien von D und H bestimmt werden (die D $\alpha$ -Linie ist um  $-0,33 \text{ \AA}$  gegenüber der Ly $\alpha$ -Linie bei  $1216 \text{ \AA}$  verschoben). Mit Hilfe von Modellrechnungen, in die u.a. die Entwicklung der beobachteten Objekte eingeht, wird auf den primordialen Wert geschlossen.

Die technische Schwierigkeit der Messung liegt darin, dass die D-Linie im Flügel der extrem gesättigten H-Linie liegt, deren Geschwindigkeitsprofil oft unbekannt ist. Da eine isotopenverschobene D-Linie von einer geschwindigkeitsverschobenen H-Linie ununterscheidbar ist, kann es leicht zu Verwechslungen kommen.

Um die durch die Sternentwicklung verursachten Unsicherheiten zu minimieren wurden außer in der solaren Umgebung und dem lokalen interstellaren Medium Messungen an Ly $\alpha$ -Absorbern mit geringer Metallizität und hoher Rotverschiebung vorgenommen. Es wird erwartet, dass diese Systeme keine signifikante Sternentwicklung durchgemacht und daher annähernd den primordialen Deuteriumwert aufweisen sollten. Messungen verschiedener Gruppen ergaben Werte, die nicht miteinander konsistent sind, was auf systematische Fehler hindeutet. Die gemessenen Werte liegen im Bereich

$$(2,3 \pm 0,6) \cdot 10^{-5} \leq (D/H) \leq (1,9, \dots, 2,5) \cdot 10^{-4}$$

der untere Wert stammt von Songaila et al. [55] der obere von Tytler et al. [64].

## Helium

He ist das zweithäufigste Element im Universum und kann daher überall mit hoher Genauigkeit gemessen werden. Da Sterne Wasserstoff zu Helium verbrennen und prozessiertes Material an das interstellare Medium zurückgeben, kann nur eine Mischung aus primordialem und von Sternen synthetisiertem He beobachtet werden. Aus diesem Grund weicht man auf metallarme, d.h. weniger entwickelte Objekte aus. Der primordiale  $^4\text{He}$ -Wert,  $Y_p$ , wird aus Messungen von metallarmen, extragalaktischen HII-Regionen oder Blue Compact Galaxies (BCGs) abgeleitet<sup>2</sup>. Hierzu werden die Häufigkeiten von Sauerstoff und Stickstoff bezüglich Wasserstoff gemessen und  $Y_p$  aus den Beziehungen

$$Y = Y_p + \frac{dY}{d(O/H)} \frac{O}{H}$$

$$Y = Y_p + \frac{dY}{d(N/H)} \frac{N}{H}$$

durch lineare Extrapolation  $Z \rightarrow 0$  bestimmt (siehe Izotov & Thuan [26] und die dort aufgeführten Referenzen). Wesentlich ist hierbei die Annahme, dass der Sauerstoffanteil bzgl. der Gesamthäufigkeit schwerer Elemente in Galaxien unterschiedlicher Metallizität konstant ist, was laut Izotov & Thuan [26], gestützt auf Modellrechnungen der chemischen Entwicklung von BCGs (Pilyugin [46] und Fields [17]), in guter Näherung zutrifft. Die Annahme eines linearen Zusammenhangs zwischen Y und N/H ist nicht unproblematisch, weil der Stickstoff nicht aus der gleichen Quelle wie der Sauerstoff stammen

<sup>2</sup>Pop II-Sterne sind zur Bestimmung der primordialen Heliumhäufigkeit ungeeignet; die meisten sind nicht heiß genug, um He-Spektrallinien anzuregen, die, die es sind, zeigen Diffusionseffekte.

### 3.2. PRIMORDIALE HÄUFIGKEITEN

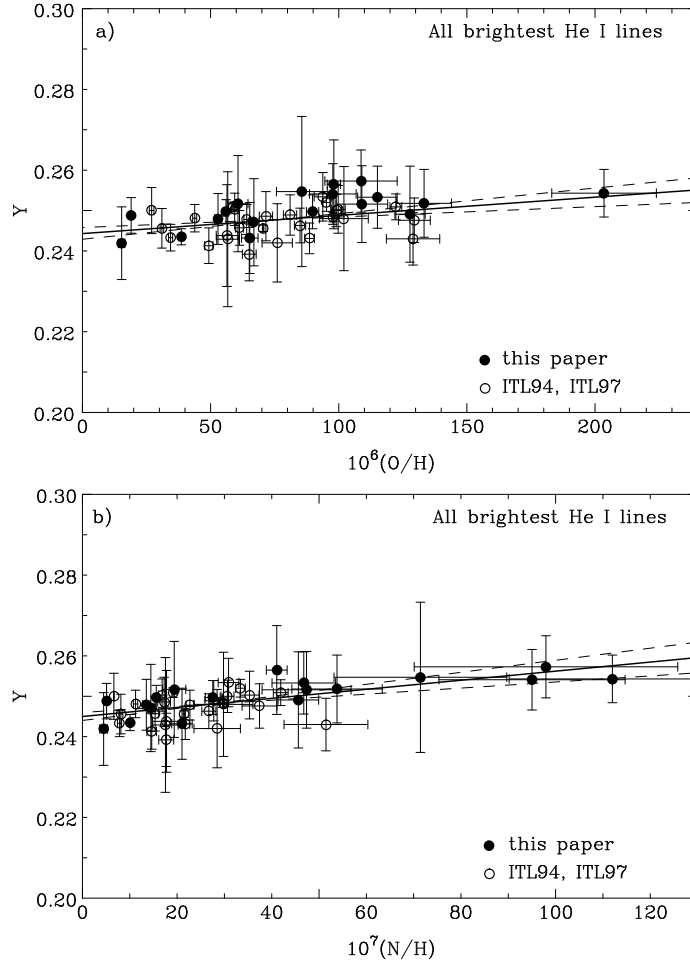


Abbildung 3.2: Lineare Regressionen von  $Y$  bzgl.  $O/H$  bzw.  $N/H$  zur Bestimmung von  $Y_p$  (aus Izotov & Thuan [26]).

muss; von Thuan et al. [62] konnte aber gezeigt werden, dass das  $N/O$ -Verhältnis bei BCGs mit  $Z < Z_\odot/8$  konstant ist, was nur zu verstehen ist, wenn der Stickstoff in den gleichen massiven Sternen, die auch den Sauerstoff synthetisiert haben, erzeugt wurde. Für den primordialen  ${}^4\text{He}$ -Wert geben Izotov & Thuan [26] folgende Zahlenwerte an:

$$\begin{aligned} Y_p &= 0,244 \pm 0,002 \text{ (aus Extrapolation } O/H \rightarrow 0) \\ Y_p &= 0,245 \pm 0,001 \text{ (aus Extrapolation } N/H \rightarrow 0) \end{aligned}$$

Diese Methode birgt einige Unsicherheiten: Die Heliumproduktion erfolgt nicht unbedingt mit der gleichen Rate wie die Metallproduktion, d.h.  $\frac{dY}{dZ}$  muss nicht für alle Objekte gleich sein. HII-Regionen sind nur sichtbar, weil das Gas durch die UV-Strahlung eingebetteter Sterne angeregt wird; die Intensität der Emissionslinien wird durch Absorptionslinien der Sternspektren künstlich abgeschwächt. Durch die Annahme, dass das Gas ausschließlich durch UV-Strahlung angeregt und ionisiert wird, werden weitere Effekte (Stöße, Reabsorption emittierter Strahlung usw.) vernachlässigt, deren Korrektur nicht ohne weiteres möglich ist.

${}^3\text{He}$  ist für die Überprüfung der BBN ungeeignet, denn es gibt große Unsicherheiten in der Interpretation der  ${}^3\text{He}$ -Häufigkeiten, was hauptsächlich daran liegt, dass Sterne in unterschiedlichen Phasen ihrer Entwicklung  ${}^3\text{He}$  produzieren und zerstören (Sterne mit 1–2 Sonnenmassen sind  ${}^3\text{He}$ -Nettoerzeuger, während massereichere Sterne  ${}^3\text{He}$ -Zerstörer sind). Derzeitige Modelle sagen viel mehr  ${}^3\text{He}$  voraus, als beobachtet wird.

### Lithium

Die Häufigkeit von Lithium ist um Größenordnungen geringer als die von Deuterium und Helium. Hochgenaue  ${}^7\text{Li}$ -Messungen sind nur an den Oberflächen naher Sterne möglich, diese können aber bereits eine chemische Entwicklung durchlaufen haben. Der primordiale  ${}^7\text{Li}$ -Wert wird durch Beobachtung sehr alter, metallarmer Pop II-Halosterne ( $Z = 1/250, \dots, 1/12Z_\odot$ ) bestimmt.

Es wird angenommen, dass sich die Lithiumhäufigkeit seit der Entstehung der Halozwerge vor fast 13 Milliarden Jahren wenig geändert hat (dies wird dadurch untermauert, dass Beobachtungen der  $\lambda = 6707,761\text{\AA}$  und  $\lambda = 6707,921\text{\AA}$  Resonanzlinien sehr alter, metallarmer Pop II-Halosterne gezeigt haben, dass diese Sterne annähernd gleiche Lithiumhäufigkeiten aufweisen<sup>3</sup>, obwohl ihre Massen und Metallizitäten unterschiedlich sind; dass unterschiedliche Auf- bzw. Abbaumechanismen den Lithiumgehalt über einen so langen Zeitraum konstant gehalten ist sehr unwahrscheinlich). Der über diese Methode erhaltene Wert liegt laut Spite & Spite [57] bei

$$\frac{{}^7\text{Li}}{\text{H}} = (11,2 \pm 3,8) \cdot 10^{-11}.$$

Die Hauptunsicherheit bei der Bestimmung der Lithiumhäufigkeit liegt in der Unkenntnis der genauen Temperaturen der Sternatmosphären. Das Verständnis der Lithiumprozessierung in Sternen ist außerdem noch lückenhaft.

### 3.2.3 Kombination von theoretischen Vorhersagen und Beobachtungen

Coc et al. [10] haben mit aktuellen Daten und Monte Carlo-Methoden die Elementhäufigkeiten der leichten Nuklide (D,  ${}^3\text{He}$ ,  ${}^4\text{He}$  und  ${}^7\text{Li}$ ) in Abhängigkeit von  $\Omega_b h^2$  berechnet. Für den durch WMAP bestimmten  $\Omega_b h^2$ -Wert ergeben sich folgende Zahlenwerte (die laut Angaben der Autoren bis auf den Wert von Li mit den Werten anderer Arbeitsgruppen gut übereinstimmen):

$$\begin{aligned} Y_p &= 0,2479 \pm 0,0004 \\ \text{D}/\text{H} &= 2,60_{-0,17}^{+0,19} \cdot 10^{-5} \\ {}^3\text{He}/\text{H} &= 1,04 \pm 0,04 \cdot 10^{-5} \\ \text{Li}/\text{H} &= 4,15_{-0,45}^{+0,49} \cdot 10^{-10} \end{aligned}$$

In Abbildung 3.3 aus Coc et al. [10] sind die auf verschiedene Weise vorhergesagten Häufigkeiten dieser Spezies graphisch dargestellt.

<sup>3</sup>Dieses Phänomen wird in alten Pop I-Sternen nicht beobachtet.

### 3.2. PRIMORDIALE HÄUFIGKEITEN

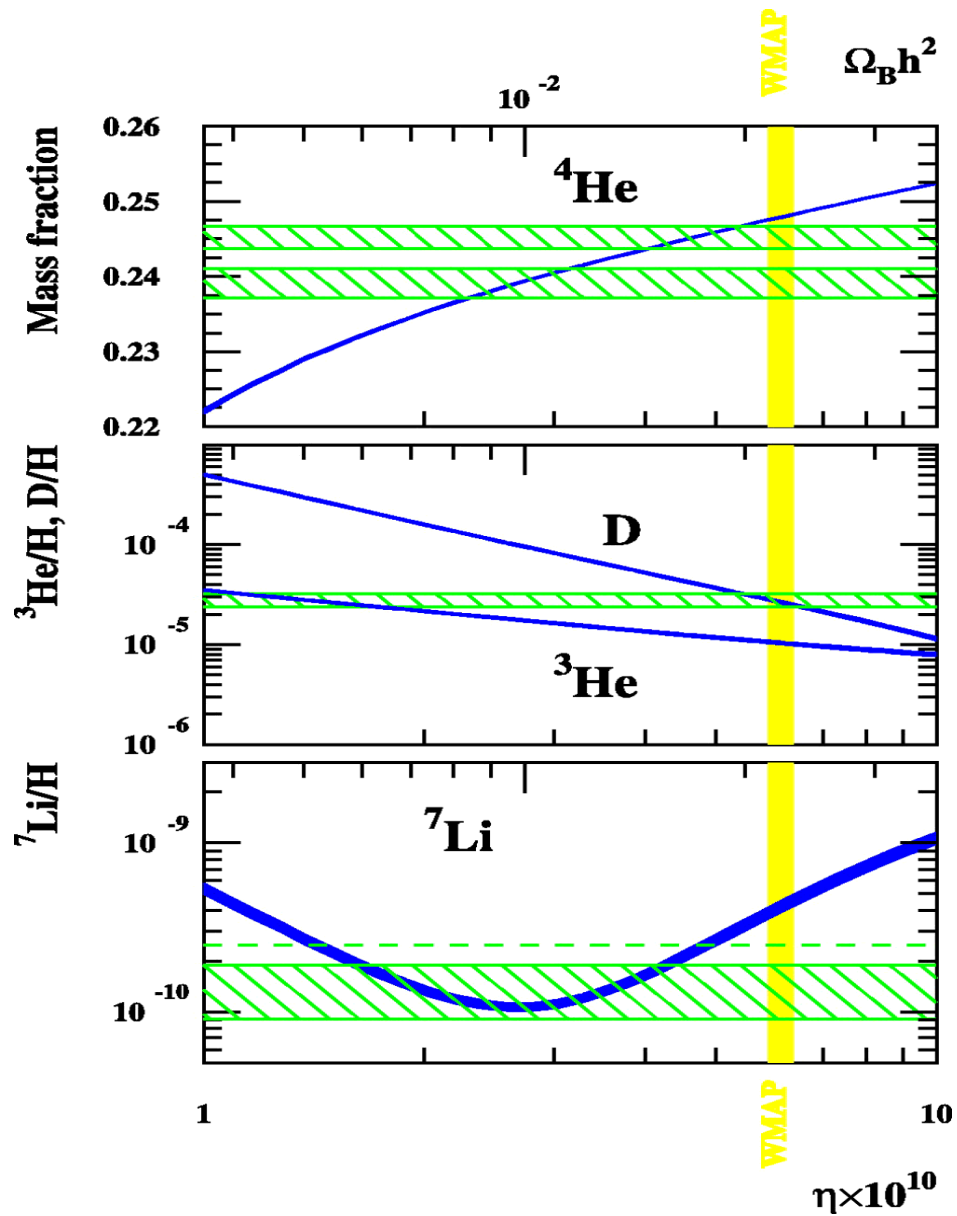


Abbildung 3.3: Häufigkeiten von  ${}^4\text{He}$  (Massenanteil), D,  ${}^3\text{He}$  und  ${}^7\text{Li}$  (Anzahl relativ zu H) in Abhängigkeit von  $\eta_{10}$  bzw.  $h\Omega_b$  aus Coc et al. [10]. Die Grenzwerte wurden aus Monte Carlo-Rechnungen gewonnen. Der schraffierte Bereich kennzeichnet die primordialen Häufigkeitswerte von  ${}^4\text{He}$ , D,  ${}^3\text{He}$  und  ${}^7\text{Li}$ , die aus verschiedenen Beobachtungen gewonnen wurden. Die durch WMAP erhaltenen Werte von  $\Omega_b h^2$  sind durch den vertikalen Streifen markiert. Für die Details sei auf die Publikation von Coc et al. [10] und die darin aufgeführten Referenzen verwiesen.

### 3.3 Gasphasenchemie

#### 3.3.1 Molekülbildungsmechanismen

Zur Bildung eines Moleküls müssen sich zwei (oder mehr) Atome bzw. Ionen so annähern, dass eine chemische Bindung entsteht; dabei ist es nicht möglich die Teilchen zusammenzuhalten und gleichzeitig die Energie- und Impulserhaltung zu gewährleisten, was bedeutet, dass entweder:

1. ein Photon emittiert, oder
2. ein Teilchen ausgestoßen, oder
3. ein drittes Teilchen die überschüssige Energie und Impuls davontragen muss. Letzteres setzt voraus, dass sich drei Teilchen gleichzeitig innerhalb der Reichweite der Wechselwirkungskräfte befinden müssen. Bei niedrigen Teilchendichten ist dies sehr unwahrscheinlich, so dass im frühen Universum Dreiteilchenreaktionen praktisch nicht zur chemischen Entwicklung beigetragen haben<sup>4</sup>.

Auf **Oberflächen** (z.B. Staubkörner) ist die Bildung von Molekülen sehr viel effizienter als in der Gasphase. Während die Stoßzeit zweier Teilchen in der Gasphase nur kurz ist, werden sie an einer Oberfläche durch Adsorption viel länger gehalten und können durch Wanderung auf der Oberfläche schließlich miteinander reagieren; außerdem kann Energie durch Wechselwirkung mit Oberflächenatomen leichter abgegeben werden. Da sich im frühen Universum noch keine Oberflächen gebildet hatten, müssen sich zu dieser Zeit die chemischen Prozesse alle in der **Gasphase** abgespielt haben.

Die Wahrscheinlichkeit, mit der eine Reaktion stattfindet, hängt u.a. davon ab, ob die oder einer der Reaktionspartner geladen ist. Neutrale Reaktionen haben um einen Faktor  $10^{-2}$  bis  $10^{-4}$  kleinere Reaktionsquerschnitte als Ion-Molekülreaktionen, da durch die Ladung des Ions die Wechselwirkung zwischen Ion und Molekül über viel größere Distanzen als nur über die Größe der Elektronenwolke um die Reaktanden wirkt.

#### Neutrale Reaktionen

Beim Stoß zweier neutraler Teilchen ist es wahrscheinlicher, dass sie aneinander abprallen, als dass sie nach Emission von Strahlung ein Molekül bilden, weil die Wahrscheinlichkeit einer Strahlungsemission innerhalb der kurzen Zeit der Stoß-Wechselwirkung sehr klein ist. Meistens ist eine (temperaturabhängige) Barriere zu überwinden. Die wichtigsten neutralen Reaktionen sind:

- **Radiative Assoziation:**  $A + B \rightarrow (AB)^* \rightarrow AB + \gamma$   
 Typischer Ratenkoeffizient:  $k \approx 10^{-17} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Die Annäherung von  $A$  und  $B$  findet entlang der Potentialkurve eines elektronisch angeregten Zustands von  $AB^*$

---

<sup>4</sup>Dreikörperstöße setzen ab relativ hohen Teilchendichten (ca.  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ) ein, gehören dann aber zu den schnellsten Reaktionsarten und spielen deswegen beim protostellaren Kollaps eine entscheidende Rolle

statt. Daraus ergibt sich ein gebundener Zwischenzustand (im Schwingungskontinuum), der durch einen Strahlungsübergang in einen gebundenen (evtl. tieferliegenden) elektronischen Zustand (diskretes Schwingungsniveau) gefolgt wird. Der Prozess ist i.a. ineffizient, da eine spontane Emission während des Stoßes (d.h. innerhalb von typischerweise  $10^{-12}$  s, ...,  $10^{-13}$  s) stattfinden muss, die radiative Lebensdauer aber erheblich länger ( $10^{-8}$  s, ...,  $10^{-6}$  s) ist.

- **Neutraler Austausch:**  $A + BC \rightarrow A + BC$   
Typischer Ratenkoeffizient:  $k \approx 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Diese Reaktionsart ist stark temperaturabhängig, weil oft hohe Aktivierungsenergien überwunden werden müssen.

#### Ion-Molekülreaktionen

Hierbei handelt es sich eigentlich um eine Reaktionssequenz. Dieser Reaktionsweg ist ein sehr effizienter Prozess zur Bildung neuer Moleküle. Die Reaktion findet bei fast jedem Stoß statt. Dabei polarisiert das positive Ion das Molekül, was eine Spiralbewegung der Teilchen aufeinander zu zur Folge hat, bis die Wechselwirkung zwischen ihnen bei einem Abstand von ca. 10 Atomradien energiereich genug ist, um einen Atomkomplex zu bilden, der seine Vorgeschichte vergessen hat. Das beteiligte Ion kann z.B. aus Photoionisation mit UV-Strahlung entstehen. Der Ratenkoeffizient  $k$  ist meist temperaturunabhängig. Dieser Reaktionstyp ist bei niedrigen Temperaturen um Größenordnungen schneller als neutrale Reaktionen. Ion-Molekülreaktionen können auch deswegen eine wichtige Rolle in der chemischen Entwicklung spielen, weil Ionen oft am Anfang von Reaktionsketten stehen. Die häufigsten Ion-Molekülreaktionen sind:

- **Ladungsaustausch:**  $A^+ + B \rightarrow A + B^+$   
Typischer Ratenkoeffizient  $k \approx 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Der Ladungsaustausch ist, solange die Stoßenergie gering ist und dadurch die Elektronen Zeit haben sich der Umgebung anzupassen, unwahrscheinlich. Bei höherer Energie wird die Stoßdauer mit der  $e^-$ -Transferzeit vergleichbar und damit der Ladungsaustausch wahrscheinlicher. Damit diese Reaktion stattfinden kann, ist außer einer Energieresonanz zwischen den Zuständen von  $A$  und  $B$  ein Überlapp der Wellenfunktionen der beteiligten Teilchen nötig. Es besteht eine schwache Temperaturabhängigkeit.
- **Radiative Rekombination:**  $A^+ + e^- \rightarrow A + \gamma$   
Typischer Ratenkoeffizient  $k \approx 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Temperaturabhängigkeit  $k \sim T^{-1/2}$  Es handelt sich um den Umkehrprozess zur Photoionisation, der insbesondere bei atomaren Ionen von Bedeutung ist (molekulare Ionen rekombinieren über andere Mechanismen).
- **Dissoziative Rekombination:**  $AB^+ + e^- \rightarrow AB^* \rightarrow A + B$   
Typischer Ratenkoeffizient  $k \approx 10^{-6} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Bei dieser Reaktion regt das einfallende Elektron ein Elektron des Ions an und besetzt ein freies Orbital in  $AB$ ; die Kerne bewegen sich entlang einer  $AB^*$ -Potentialkurve. Es findet ausschließlich ein Energieaustausch zwischen den Elektronen, nicht zwischen Elektronen und Kernen statt.

Die dissoziative Rekombination ist ein wichtiger Zerstörungsprozess molekularer Ionen;  $\sigma_{DR}$  ist in Speicherringen bestimmbar, Information über den Bereich der



Schwingungszustände des molekularen Ions und angeregter Endzustände der neutralen Atome sind aber schwierig zu erhalten, daher sind Schlüsse auf den Umkehrprozess ( $\sigma_{AI}$ ) schwierig.

### Reaktionen mit Beteiligung negativer Ionen

Im Gas kommen neben neutralen Atomen und Molekülen auch Elektronen vor, die mit diesen Teilchen reagieren und negative Ionen hervorbringen können:

- **Radiative Attachment:**  $A + e^- \rightarrow A^- + \gamma$   
 Typischer Ratenkoeffizient  $k \approx 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Das Elektron reagiert hier mit einem neutralen Atom bzw. Molekül  $A$  (mit positiver Elektronaffinität). Im Gegensatz zur radiativen Rekombination des Elektrons mit einem positiv geladenen Ion handelt es sich hier um eine Reaktion mit einem neutralen Teilchen, bei der die Wechselwirkung viel schwächer, folglich der Ratenkoeffizient entsprechend kleiner ist. Er kann folgendermaßen grob abgeschätzt werden: Der typische Stoßratenkoeffizient für ladungsinduzierte Dipolreaktionen liegt bei etwa  $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Dieser Wert muss mit der Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Reaktion stattfindet, multipliziert werden. Die Stoßzeit ist aufgrund der hohen Geschwindigkeit des Elektrons sehr kurz ( $10^{-14} \text{ s}$ ), die radiative Lebensdauer dagegen viel länger ( $10^{-8} \text{ s}$ ), was eine Wahrscheinlichkeit für die Strahlungsemission von etwa  $10^{-6}$  ergibt. Für den Ratenkoeffizienten gibt es keine experimentell bestimmten Werte, quantenmechanische Rechnungen bestätigen jedoch den eben abgeschätzten Wert in der Größenordnung von  $k \approx 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ .
- **Photodetachment:**  $A^- + \gamma \rightarrow A + e^-$   
 Umkehrreaktion zum radiative attachment, über die negativ geladene Ionen (meist rasch) abgebaut werden. Die Wechselwirkungsenergie zwischen einem Elektron und einem neutralen Teilchen ist in der Regel schwach, was diesen Prozess aus zwei Gründen recht effizient macht: Einerseits sind Photonen aus einem weiten Wellenlängenbereich in der Lage, das schwach gebundene Elektron abzulösen. Andererseits ist der elektrische Dipol des Ions wegen des in der Regel großen Abstands zwischen neutralem Teilchen und Elektron groß. Dies hat zur Folge, dass der Wechselwirkungsquerschnitt für Photodetachment im Vergleich zu dem für Photodissoziation groß ist. Für diese Reaktionsart wurden detaillierte Berechnungen durchgeführt, insbesondere für  $\text{H}^-$ . Sie ergaben einen mittleren Wirkungsquerschnitt von etwa  $2 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ . Es wird erwartet, dass dieser Wert für andere Systeme ähnlich groß ist, da es bei der Berechnung des Wirkungsquerschnittes nicht sehr auf die Beschaffenheit von  $A$  und  $A^-$  ankommt.
- **Associative detachment:**  $A^- + B \rightarrow AB + e^-$   
 In diesem Fall wird die Wechselwirkung zwischen dem neutralen Teilchen und dem negativen Ion in erster Näherung durch ladungsinduzierte Dipolwechselwirkung dominiert. Der Stoßratenkoeffizient für diese Art von Reaktionen liegt bei etwa  $10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ , ein Wert der auch für associative detachment gelten würde, sofern die Reaktion bei nahezu jedem Stoß stattfände. Ob dies der Fall ist, hängt davon ab, wie sich die Reaktionspartner  $A^-$  und  $B$  entlang der Potentialkurven

annähern: Findet die Annäherung entlang einer abstoßenden Kurve statt, kommt es nur zu elastischer Streuung. Bei Annäherung entlang einer anziehenden Potentialkurve, kann es zu einem autoionisierenden Übergang in einen gebundenen Zustand von  $AB$  kommen, falls der Abstand  $r$  zwischen den Teilchen kleiner als der Kreuzungspunkt der Potentialkurven  $r_c$  wird. Diese Übergänge sind exotherm und – da die Zeit, während der der Abstand  $r < r_c$  ist viel länger als die Autoionisationszeit (ca.  $10^{-14}$  s) ist – stark bevorzugt. Der Übergang findet also bei annähernd jedem Stoß statt, d.h. der Ratenkoeffizient entspricht in etwa dem Stoßratenkoeffizienten. Andererseits kann die Situation so sein, dass es keinen Kreuzungspunkt zwischen den Potentialkurven der Reaktionspartner und des neutralen Zustands gibt. In diesem Fall findet keine Reaktion statt. Insgesamt bedeutet dies, dass die Reaktion entweder mit hoher Rate, oder gar nicht stattfindet. Experimente ergaben, dass für den Fall, dass es sich bei  $A^-$  und  $B$  um Atome handelt, alle exothermen associative detachment-Reaktionen schnell stattfinden. Bei Molekülen ist keine allgemeine Aussage möglich; es gibt je nach beteiligter Spezies sowohl langsam als auch schnell ablaufende Reaktionen.

- **Wechselseitige Neutralisierung:**  $A^- + B^+ \rightarrow A + B$   
 Typischer Ratenkoeffizient  $k \approx 10^{-6} T^{-1/2} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ . Ein sehr schneller Prozess. Hier wird die Wechselwirkung zwischen den Teilchen durch langreichweitige Coulombkräfte dominiert, der Wechselwirkungsquerschnitt ist also sehr groß. Während sich die Reaktionspartner  $A^-$  und  $B^+$  annähern, ist ein Übergang auf den gebundenen Zustand  $AB$  möglich, falls die entsprechenden Potentialkurven nahe genug beieinander liegen. Sowohl Berechnungen als auch Messungen bestätigen, dass diese Übergänge möglich sind. Der Ratenkoeffizient ist groß und hat bei niedrigen Temperaturen eine  $T^{-1/2}$ -Abhängigkeit, d.h. die Neutralisierung wird bei langsamer Annäherung bevorzugt.

## 3.4 Die ersten chemischen Prozesse im Universum

Die Chemie im frühen Universum ist nicht sehr vielfältig, da nach dem Urknall nur wenige chemische Spezies vorhanden waren. Anfangs waren alle Atome ionisiert; die durch die Expansion des Universums bedingte Abkühlung führte ca. 10 000 Jahre nach dem Big Bang zum Übergang des strahlungsdominierten zum materiedominierten Weltall. Durch die stufenweise Rekombination der Atome, beginnend mit den Atomen mit dem höchsten Ionisationspotential, wurden Strahlung und Materie entkoppelt. Von diesem Zeitpunkt an entwickelten sich Strahlungs- und Materietemperatur nicht mehr auf gleiche Weise<sup>5</sup>:

$$\begin{aligned} T_r &\sim (1+z) \\ T_m &\sim (1+z)^2. \end{aligned}$$

Die Expansion des Weltalls (Entwicklung der Teilchendichte  $n_H \sim (1+z)^3$ ) hatte außerdem zur Folge, dass die Rekombinationszeitskala länger als das Alter des Universums

---

<sup>5</sup>Genaugenommen entwickeln sich die Temperaturen der neutralen und geladenen Spezies unterschiedlich, werden aber durch diverse Mechanismen so gekoppelt, dass es zwischen  $T_{e^-}$ ,  $T_{\text{ion}}$  und  $T_{\text{neutr}}$  keine signifikanten Unterschiede gibt (s. Puy et al. [48]).

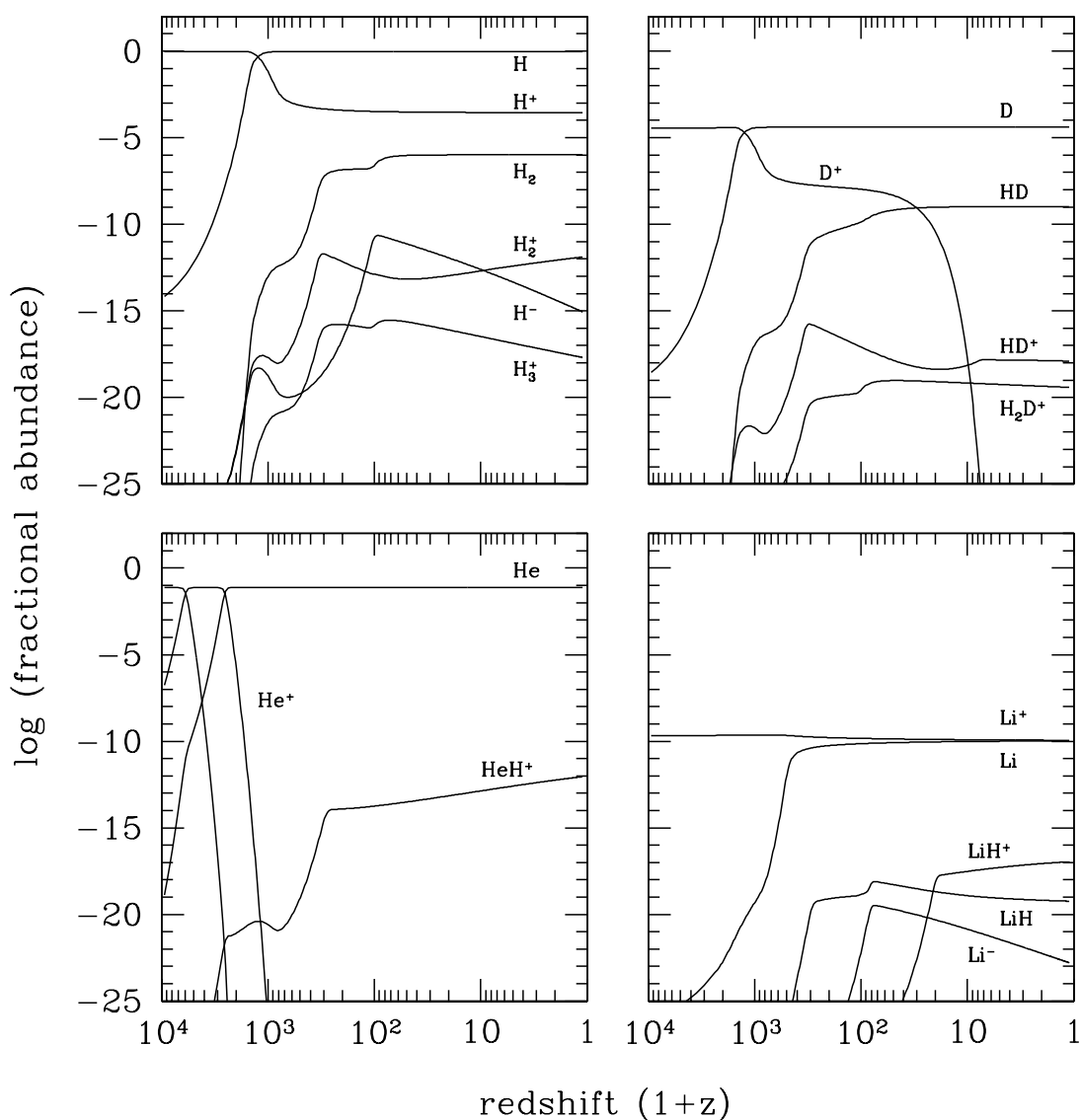


Abbildung 3.4: Entwicklung der wichtigsten H-, D-, He- und Li-haltigen Spezies im frühen Universum in Abhängigkeit von der Rotverschiebung  $z$  (aus Galli & Palla [20]).

wurde, d.h. die Rekombination war nie vollständig. Dieser Punkt ist von entscheidender Bedeutung für die weitere chemische Entwicklung, weil Ion-Molekülreaktionen viel schneller als neutrale Reaktionen ablaufen.

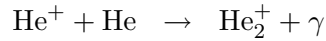
Nachfolgend wird zusammenfassend die Bildung der für den protostellaren Kollaps, vor allem in Hinblick auf die Kühlung des primordialen Gases, wichtigen Moleküle geschildert. Das in dieser Arbeit benutzte chemische Netzwerk ist nebst Reaktionskoeffizienten in Anhang B aufgelistet. Es basiert auf den Arbeiten von Galli & Palla [20], Puy, D. et al. [48], Lepp, S.; Stancil, P. C.; Dalgarno, A. [32], Palla, F.; Salpeter, E. E.; Stahler, S. W. [43] und Stancil, P. C.; Lepp, S.; Dalgarno, A. [58], [59].

Eine recht ausführliche Beschreibung der chemischen Prozesse im frühen Universum ist z.B. in Galli & Palla [20] nachzulesen. Die aus Rechnungen dieser Art resultierenden

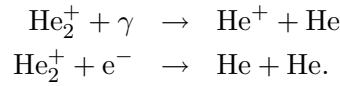
Häufigkeiten geben einen guten Anhaltspunkt für die Anfangswerte der chemischen Spezies, die in dieser Arbeit für die Durchführung der Simulationsrechnungen benötigt werden. Abbildung 3.4 aus Galli & Palla [20] zeigt die Häufigkeiten der wichtigsten Spezies und deren zeitliche Entwicklung zusammenfassend dargestellt.

#### 3.4.1 Helium

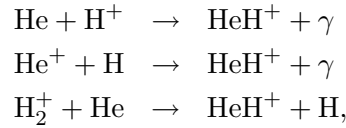
Mit einer Ionisierungsenergie  $E_{\text{ion}} = 24,6 \text{ eV}$  war Helium das erste neutrale Atom und  $\text{He}_2^+$  und  $\text{HeH}^+$  die ersten Moleküle<sup>6</sup>.  $\text{He}_2^+$  wird über die Reaktion



erzeugt. Der Abbau geschieht über Photodissoziation und radiative Rekombination

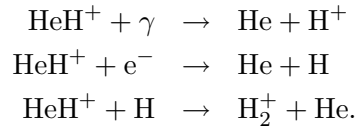


Die später einsetzende radiative Rekombination von  $\text{He}^+$  ( $\text{He}^+ + e^- \rightarrow \text{He} + \gamma$ ) unterdrückt zusätzlich den Aufbau von  $\text{He}_2^+$ . Die Entstehung von atomaren He ermöglicht aber die Bildung von  $\text{HeH}^+$  bzw.  $\text{HeD}^+$  über die Reaktionen



wobei die letzte Reaktion über einen angeregten  $\text{H}_2^+$ -Zustand abläuft.

Die Zerstörung von  $\text{HeH}^+$  und  $\text{HeD}^+$  geschieht durch Photodissoziation, radiative Rekombination und Reaktionen mit H:



Die Reaktionen, die zum Auf- und Abbau von  $\text{HeD}^+$  führen, verlaufen analog zu den oben aufgelisteten.

Helium ist zwar das zweithäufigste Element, aber chemisch inert, so dass es, abgesehen vom indirekten Beitrag zur  $\text{H}_2$ -Bildung, bei der chemischen Entwicklung des primordialen Gases praktisch keine Rolle spielt.

#### 3.4.2 Wasserstoff und Deuterium

Die Wasserstoffchemie beginnt mit der radiativen Rekombination von Protonen und Elektronen:




---

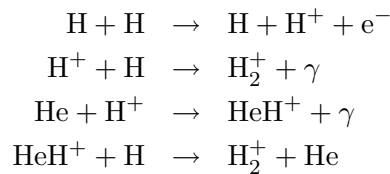
<sup>6</sup>Laut Dalgarno [12] bei  $z \approx 2500$  gebildet.

wobei die Photonen hauptsächlich durch Rekombination in angeregte Zustände abgegeben werden, so dass durch sie andere Wasserstoffatome nicht wieder ionisiert wurden.

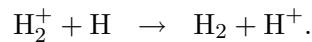
Das häufigste und wichtigste Molekül im frühen Universum ist  $\text{H}_2$ . Der effizienteste  $\text{H}_2$ -Bildungsweg wäre die direkte Bildung über einen Stoß ( $\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \gamma$ ), dies ist aber im Grundzustand aufgrund des fehlenden elektrischen Dipolmoments von  $\text{H}_2$  nicht möglich. Falls eins der Wasserstoffatome in einem angeregten Zustand ist, kann  $\text{H}_2$  durch radiative Assoziation gebildet werden. Dieser Prozess ist aber im frühen Universum unbedeutend, weil sich die H-Population fast ausschließlich im Grundzustand befand. Molekularer Wasserstoff hat sich über andere Wege (in zwei Phasen) gebildet:

### Protonen als Katalysator

Die Sequenz beginnt mit der Bildung von  $\text{H}_2^+$  durch radiative Assoziation



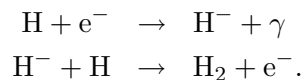
gefolgt von einer Ladungsaustauschreaktion



Die Reaktionskette wird durch die Photodissoziation von  $\text{H}_2^+$  ( $E_{\text{diss}} = 2,64 \text{ eV}$ ) limitiert.

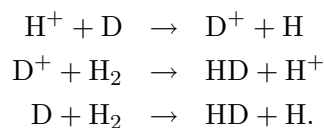
### Elektronen als Katalysator

Diese Reaktionssequenz wurde von McDowell [36] vorgeschlagen:



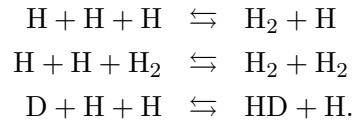
Dieser Reaktionspfad ist effizienter als die  $\text{H}_2^+$ -Sequenz, setzt aber wegen der niedrigen Dissoziationsenergie von  $\text{H}^-$  ( $E_{\text{diss}} = 0,75 \text{ eV}$ ) erst später ein (laut Dalgarno [12] bei  $z \approx 100$ ). Über diesen Weg ist ein  $\text{H}_2$ -Anteil von  $f_{\text{H}_2} \approx 10^{-3}$  erreichbar.

HD ist, was die Entstehung angeht, hauptsächlich die isotopische Version von  $\text{H}_2$  (die Bildung setzt etwas früher ein), wobei es eine weitere Reaktion gibt:

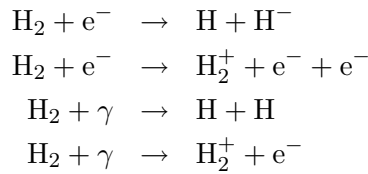


#### Dreikörperstöße

In der Gasphase sind 3-Körperstöße der effizienteste  $\text{H}_2$ -Bildungsweg. Über diesen Prozess kann der gesamte atomare in molekularen Wasserstoff umgewandelt werden; er setzt aber erst ab Teilchendichten  $n \gtrsim 10^8 \text{ cm}^{-3}$  ein

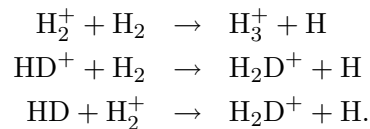


Der Abbau von  $\text{H}_2$  kann auch über die Reaktionen

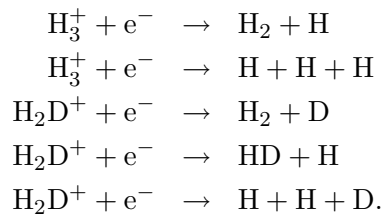


stattfinden.

Weitere molekulare Ionen sind  $\text{H}_3^+$  und  $\text{H}_2\text{D}^+$ . Sie entstehen über die Reaktionen

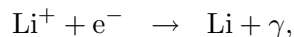


Der Abbau geschieht durch dissoziative Rekombination:

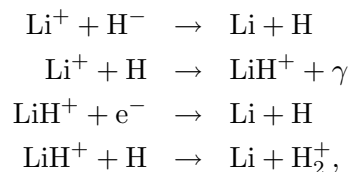


#### 3.4.3 Lithium

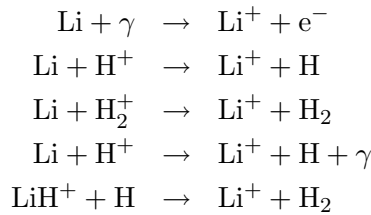
Die Lithiumchemie ( $E_{\text{ion}} = 5,39 \text{ eV}$ ) setzt aufgrund der kleinen Teilchendichte als letzte ein. Die lithiumhaltigen Spezies sind  $\text{Li}$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Li}^-$ ,  $\text{LiH}$  und  $\text{LiH}^+$ . Die Lithiumchemie beginnt mit der Rekombination von  $\text{Li}$



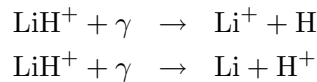
weitere atomares Lithium ergebende Reaktionen sind:



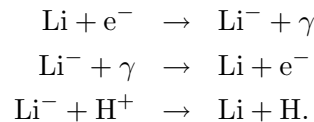
während  $\text{Li}^+$  durch die Reaktionen



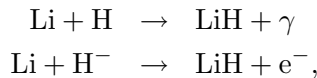
entstehen kann. Außer über die obigen Reaktionen wird  $\text{LiH}^+$  auch durch Photodissoziation abgebaut:



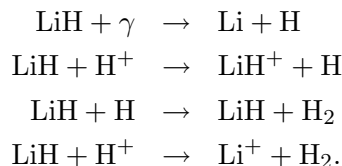
$\text{Li}^-$  wird durch radiative attachment gebildet und durch photodetachment bzw. gegenseitige Neutralisation abgebaut:



Mit der Entstehung von atomaren Lithium konnte Lithiumhydrid gebildet werden:



das durch Photodissoziation, Ladungsaustausch und Austauschreaktionen zerstört werden kann:



Der Hauptentstehungsweg von Lithiumhydrid läuft über associative detachment von  $\text{Li}^-$  und  $\text{H}$  ( $\text{Li}^- + \text{H} \rightarrow \text{LiH} + \text{e}^-$ ).

Die Häufigkeit von  $\text{LiH}$  ist sehr gering, der Beitrag zur Opazität (s. Mayer [35]) jedoch nicht zu vernachlässigen.

Die Anfangswerte der Konzentrationen der chemischen Spezies, wie sie in den Modellrechnungen benutzt werden, sind in Tabelle 3.1 aufgelistet. Die Werte wurden so gewählt, dass die Konzentration nicht zu weit vom chemischen Gleichgewicht entfernt war (Abbildung 3.4). Der Schwellenwert für ausreichend effiziente Kühlung durch molekularen Wasserstoff liegt bei  $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-4}$  (Norman, Abel und Bryan [40], Abel et al. [2], [1], Bromm et al. [9]). Um zu überprüfen, ob auch eine geringere Anfangsmenge an  $\text{H}_2$  genügt, um die Konfiguration ausreichend zu kühlen, wurden ebenfalls Rechnungen mit einer Anfangskonzentration von  $10^{-10}$  durchgeführt. Die  $\text{H}^+$ -Konzentration wurde so gewählt, dass das Gas insgesamt elektrisch neutral ist.

### 3.5. THERMISCHE ENTWICKLUNG DES GASES

---

Tabelle 3.1: Anfangswerte der Konzentrationen der chemischen Spezies in den Modellrechnungen der vorliegenden Arbeit (Erläuterungen im Text).

Spezies	Konzentration $c$
H	$1 - \sum_{i \neq H} c_i$
H <sup>+</sup>	Ladungserhaltung
H <sup>-</sup>	$1 \cdot 10^{-15}$
H <sub>2</sub>	$5 \cdot 10^{-4}, 1 \cdot 10^{-10}$
H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	$1 \cdot 10^{-15}$
H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	$1 \cdot 10^{-15}$
e <sup>-</sup>	$1 \cdot 10^{-10}$

### 3.5 Einfluss der chemischen Zusammensetzung auf die thermische Entwicklung des Gases

Allgemeine Aussagen zur thermischen Entwicklung eines Gases zu machen ist nicht möglich, da es auf das komplexe Zusammenspiel diverser Heiz- und Kühlprozesse ankommt.

Ein wesentlicher Faktor, der zur Abkühlung des Gases führt, ist die adiabatische Expansion des Universums. Diese war vor der Entstehung von Molekülen der dominierende Prozess. Die Abkühlung des Gases durch Expansion des Universums spielt auf der Zeitskala der Sternbildung keine nennenswerte Rolle, ganz im Gegensatz zur Erwärmung des Gases durch Kompression während der Kontraktion der protostellaren Wolke. Ob sich ein Stern bilden kann, hängt entscheidend davon ab, ob das Gas die während der Kompression entstehenden Wärme abstrahlen kann oder nicht, und wie sich die Kühlzeitskala  $t_{\text{cool}}$  zur dynamischen Zeitskala  $t_{\text{ff}}$  verhält. Nur wenn  $t_{\text{cool}} < t_{\text{ff}}$  ist, wird der Kollaps der protostellaren Wolke nicht durch den thermischen Druck aufgehalten.

Durch das Wechselspiel zwischen den Atomen und Molekülen des Gases und dem Strahlungsfeld wird die Beschreibung der thermischen Entwicklung des Gases komplizierter: Es besteht ein steter Energieaustausch zwischen dem (im primordialen Fall staublosen) Gas und dem Strahlungsfeld. Dabei wird das Gas geheizt, wenn es durch die Absorption eines Photons und anschließende Stoßanregung der Translationsfreiheitsgrade eines weiteren Teilchens Energie vom Strahlungsfeld aufnimmt, oder gekühlt, wenn ein Teilchen durch einen Stoß angeregt wird und diese Energie durch Emission eines Photons an das Strahlungsfeld abgibt<sup>7</sup>.

Beim protostellaren Kollaps ist vor allem die Kühlung der kontrahierenden Wolke von Interesse. Neben der Abstrahlung von Photonen ins Kontinuum, der durch die Lösung der (frequenzabhängigen) Strahlungstransportgleichung (s. Abschnitt 2.2.1) Rechnung getragen wird, spielt die Abstrahlung durch Linien eine wichtige, möglicherweise entscheidende Rolle.

Das Prinzip bei der Berechnung einer Kühlfunktion ist recht einfach: Es müssen alle Übergänge, die durch Strahlung und Stöße verursacht werden, berücksichtigt und auf-

---

<sup>7</sup>Hierbei wird vorausgesetzt, dass das Photon nicht reabsorbiert wird, andernfalls würde es sich lediglich um einen Energietransfer innerhalb des Gases handeln (der natürlich auch vorkommt).



summiert werden; auf diese Weise erhält man die Kühlfunktion pro Molekül  $W(X)$  für ein Molekül  $X$ :

$$W(X) = \frac{1}{n_X} \sum_{vJ, v'J'} (E_{vJ} - E_{v'J'}) n_{vJ} A(vJ \rightarrow v'J') \quad [\text{erg s}^{-1}]. \quad (3.2)$$

Dabei sind  $E_{vJ} > E_{v'J'}$  die Energien der Rotations-Vibrations-Zustände  $vJ$  und  $v'J'$ ,  $n_{vJ}$  die Teilchendichte im Zustand  $vJ$  und  $A(vJ \rightarrow v'J')$  die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand  $vJ$  nach  $v'J'$ .

Die Umsetzung in die Praxis ist aufwendig und komplex; sie erfordert neben der Einbeziehung des Strahlungsfeldes die möglichst genaue Kenntnis der Prozesse zwischen den beteiligten Atomen und Molekülen, d.h. für jedes Atom bzw. Molekül müssen alle Strahlungs- und Stoßübergangswahrscheinlichkeiten (Wirkungsquerschnitte) bekannt sein. Ebenso sind die Schwingungs- und Rotationsübergänge zu berücksichtigen.

Alternativ dazu kann zur Bestimmung der Kühlfunktion ausgenutzt werden, dass, wie in Abschnitt 2.3.1 kurz beschrieben, Gas und Strahlungsfeld über die Opazität koppeln. In der Energiegleichung und der Gleichung für das 0. Strahlungsmoment  $J$  (Gleichungen (2.5) bzw. (2.10)) werden der Energieaustausch zwischen Gas und Strahlungsfeld durch den  $\rho(\kappa_{J,S} - \kappa_{S,S})$ -Term beschrieben, wobei das Planckmittel der Opazität benutzt wird:  $\kappa_{J,S} = \kappa_P$  (Abschnitt 2.3.1).

Wenn bei der Berechnung des Planckmittels der Opazität Absorptions- und Emissionsprozesse (Kontinuum **und** Linien) einbezogen werden, entspricht dies (formal) der Berechnung einer Kühlfunktion: Jedem Prozess  $i$ , bei dem die Spezies  $j$  (und  $k$  bei Zweiteilchenprozessen) beteiligt ist, wird ein Wirkungsquerschnitt  $\sigma_{ij}$  (bzw.  $\sigma_{ijk}$ ) zugeordnet. Bei einer Gasmixtur diverser Spezies kann der mit der Teilchendichte  $n_j$  gewichtete monochromatische Absorptionskoeffizient geschrieben werden als

$$\kappa(\nu) = \sum_j n_j \sigma_{ij}(\nu) + \sum_{j,k} n_j n_k \sigma_{ijk}(\nu). \quad (3.3)$$

Wird hiermit das Planckmittel gebildet, erhält man:

$$\begin{aligned} \kappa_P &= \frac{\pi}{\rho \sigma T^4} \int \kappa(\nu) B_\nu d\nu \\ &= \frac{\pi}{\rho \sigma T^4} \int \left( \sum_j n_j \sigma_{ij}(\nu) + \sum_{j,k} n_j n_k \sigma_{ijk}(\nu) \right) B_\nu d\nu \\ &= \sum_j \frac{n_j}{\rho} \frac{\pi \int \sigma_{ij}(\nu) B_\nu d\nu}{\sigma T^4} + \sum_{j,k} \frac{n_j n_k}{\rho} \frac{\pi \int \sigma_{ijk}(\nu) B_\nu d\nu}{\sigma T^4}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die Zahlenwerte für  $\kappa(\nu)$  wurden von Michael Mayer zur Verfügung gestellt<sup>8</sup>.

Die Opazität für Linienemission lautet:

$$\kappa_P = \frac{hc}{4\pi \sigma T^4 Q(T)} \sum_{1 \rightarrow 2} g_1 A_{12} \left( \exp \left[ \frac{E_1}{k_B T} \right] - \exp \left[ \frac{E_2}{k_B T} \right] \right) \frac{k_{1 \rightarrow 2}}{\exp \left[ \frac{hc k_{1 \rightarrow 2}}{k_B T} \right] - 1}. \quad (3.5)$$

<sup>8</sup>persönliche Mitteilung

### 3.5. THERMISCHE ENTWICKLUNG DES GASES

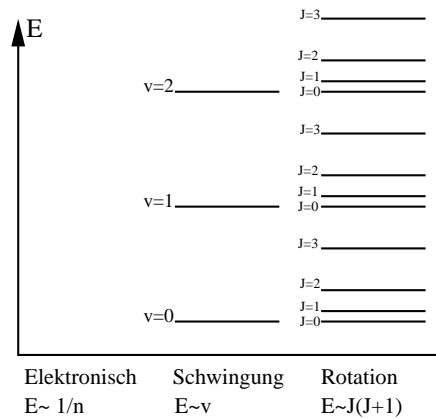


Abbildung 3.5: Energieniveaus eines Moleküls

Bei hohen Temperaturen ( $T \gtrsim 10^4$  K) ist keine Molekülbildung möglich; es können nur Atome existieren, bei denen außer Ionisationsprozessen nur elektronische Übergänge stattfinden und zur Opazität beitragen.

Wenn die Temperatur im Bereich von bis zu einigen tausend Kelvin liegt, findet Molekülbildung statt, ohne dass die Moleküle sofort wieder dissoziiert werden. Moleküle haben zusätzliche Freiheitsgrade, die je nach Temperatur angeregt bzw. eingefroren sein können. Wie in Abbildung 3.5 angedeutet, beinhaltet jeder elektronische Energiezustand Schwingungszustände  $v$ , diese wiederum Rotationszustände  $J$ . Die Energiedifferenz zwischen den Übergangsarten liegt in etwa eine Größenordnung auseinander.

Als molekulare Kühler kommen im frühen Universum nur  $\text{H}_2$ , HD, LiH in Frage. Die entsprechenden Kühlfunktionen sind (nach Berechnungen von Galli & Palla [20]) in Abbildung 3.6 dargestellt. Schön zu sehen ist, in welchem Temperaturbereich die Kühlung durch Moleküle eine Rolle spielt: Während durch  $\text{H}_2$  nur bis auf knapp unter 100 K gekühlt werden kann, ist die Kühlung durch HD fast eine weitere Größenordnung wirksam. Durch LiH könnte das Gas bis auf wenige Kelvin abgekühlt werden.

#### Kühlung durch $\text{H}_2$

Obwohl  $\text{H}_2$  wegen des fehlenden elektrischen Dipolmoments ein schlechter Strahler ist, wird der größte Anteil zur Kühlung des primordialen Gases durch  $\text{H}_2$  beigetragen, weil dies das häufigste Molekül ist.  $\text{H}_2$  besitzt bestimmte Eigenschaften, die es von HD, LiH unterscheidet:

- Es hat kein permanentes Dipolmoments. Deswegen sind Rotations- und Schwingungsübergänge innerhalb des elektronischen Grundzustands nur durch Quadrupolstrahlung möglich; die Übergangswahrscheinlichkeit ( $A \approx 10^{-11} \text{ s}^{-1}$  für den am tiefsten liegenden Übergang) ist proportional  $E_{ij}^5$ .
- Das Molekül besteht aus zwei ununterscheidbaren Protonen (Fermionen mit Spin  $S = 1/2$ ); die Parität der Gesamtwellenfunktion muss also negativ sein. Aus diesem Grund gibt es zwei Möglichkeiten für den Gesamtkernspin  $I$ :

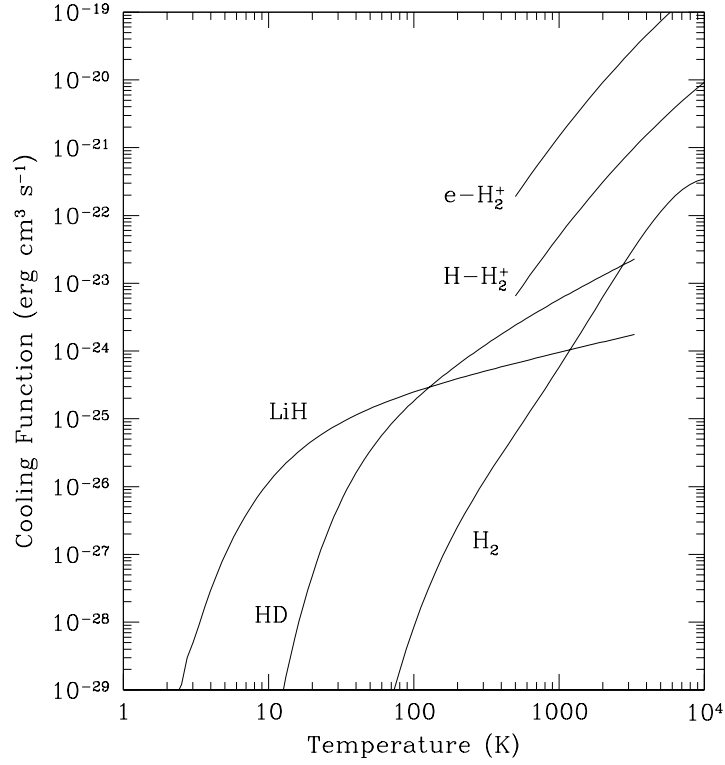


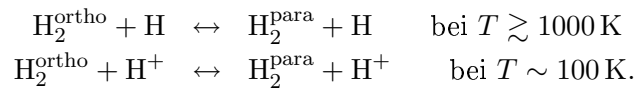
Abbildung 3.6: Kühlfunktion pro Molekül ( $\text{H}_2$ , HD, LiH und  $\text{H}_2^+$ ) für  $n(\text{H}) = 10^2 \text{ cm}^{-3}$  (aus Galli & Palla [20]).

$I = 1$ : **ortho- $\text{H}_2$** ; Triplett ( $\uparrow\uparrow, \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow), \downarrow\downarrow$ ). Die Spinwellenfunktion ist gegen die Vertauschung der Teilchen symmetrisch, die Rotationszustände haben negative Parität. Die Rotationsquantenzahl  $J = 1, 3, 5, \dots$  ist ungerade.

$I = 0$ : **para- $\text{H}_2$** ; Singulett  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$ . Die Spinwellenfunktion ist gegen Vertauschung der Teilchen antisymmetrisch, die Rotationszustände haben positive Parität, die Rotationsquantenzahl nimmt gerade Werte an:  $J = 0, 2, 4, \dots$

Da die Abstände zwischen  $J = 0 \rightarrow 2 = 510 \text{ K}$  und  $J = 1 \rightarrow 3 = 845 \text{ K}$  unterschiedlich groß sind, hängt die Abstrahlung von  $\text{H}_2$  auch vom Verhältnis von  $\text{H}_2^{\text{ortho}}$  zu  $\text{H}_2^{\text{para}}$  ab; es beträgt im thermischen Gleichgewicht  $\frac{g_s}{g_a} = \frac{I+1}{I} = \frac{3}{1}$  (Spinstatistik). In Flower & Pineau des Forêts [19] wird gezeigt, dass das Verhältnis von  $\text{H}_2^{\text{ortho}}$  zu  $\text{H}_2^{\text{para}}$  im primordialen Gas mit der Zeit keineswegs konstant gewesen sein muss.

Nach den Auswahlregeln sind nur Strahlungsübergänge mit  $\Delta J = \pm 2$  erlaubt, d.h. die Strahlungsumwandlung  $\text{H}_2^{\text{ortho}} \leftrightarrow \text{H}_2^{\text{para}}$  ( $\Delta J = \pm 1$ ) ist verboten. Das ortho-para-Verhältnis kann aber durch reaktive Stöße mit H oder  $\text{H}^+$  verändert werden:



Diese Tatsache macht die Berechnung der Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten für die Übergänge kompliziert, da es neben der Rotationsanregung mit  $\Delta J = \pm 2$  auch

einen reaktiven Reaktionskanal mit  $\Delta J = \pm 1$  gibt. Bei Stoßübergängen werden hauptsächlich die tiefliegenden  $(v, J)$ -Zustände bevölkert (innerhalb eines Schwingungsniveaus steigt die Stoßabregungsrate mit steigendem  $J$  proportional zu  $J$ ).

Das System H – H<sub>2</sub> ist Dank umfangreicher Untersuchungen mit klassischen und quantenmechanischen Methoden recht gut bekannt; bis auf Ausnahmen in Detailfragen sind gute Daten vorhanden.

Je nach Umgebung können einige Übergänge wichtiger sein als andere; vorausszusagen, welche das sind, ist normalerweise aufwendiger als die Berücksichtigung sämtlicher möglichen Übergänge. Die tiefste durch H<sub>2</sub>-Kühlung erreichbare Temperatur liegt bei  $T_{\min} = E_{J=2 \rightarrow J=0}/k_B \approx 510$  K. Sind die Niveaus gemäß LTE besetzt, befinden im hochenergetischen Schwanz der Maxwellverteilung noch genügend Teilchen, über die das Gas auf  $\approx 100$  K abkühlen kann, tiefere Temperaturen sind über H<sub>2</sub>-Kühlung allein nicht erreichbar.

Eine aufwendige Untersuchung zur Kühlung wasserstoffhaltigen Gases wurde von Le Bourlot et al. [30] durchgeführt. Die von dieser Gruppe berechnete Kühlfunktion für H<sub>2</sub> wurde im Rahmen des Collaborative Computational Project [11] (auch) als Fortranroutine veröffentlicht.

#### Kühlung durch HD

Das Verhalten von HD entspricht im Wesentlichen dem von H<sub>2</sub>; allerdings gibt es einige Unterschiede:

- Es gibt Rotations- und Schwingungsübergänge (Dipol und Quadrupol).
- Der Massenschwerpunkt liegt nicht in der Mitte des Moleküls; daher sind die Potentiale asymmetrisch, was dazu führt, dass bei Stößen Übergänge mit  $\Delta J = \pm 1$  erlaubt sind (diese dominieren die inelastische Streuung).
- Die Berechnung der Wirkungsquerschnitte ist aus technischen Gründen aufwendiger als bei H<sub>2</sub> (Wirkungsquerschnitte u.U. sehr klein, daher empfindlicher für Ungenauigkeiten in den Potentialen), aber genauer machbar.
- Der Beitrag zur Kühlung ist aufgrund der geringen Häufigkeit ( $\frac{D}{H} \approx 10^{-5}$ ) klein, aber da HD im Gegensatz zu H<sub>2</sub> ein nicht verschwindendes Dipolmoment (dadurch ist der Abstand zwischen den Energieniveaus größer) und eine kleinere Rotationskonstante hat, kühlt dieses Molekül auch noch bei tieferen Temperaturen als H<sub>2</sub>. Der Übergang zwischen den am tiefsten liegenden Niveaus entspricht einer Temperatur  $T_{\min} = E_{J=1 \rightarrow J=0}/k_B \approx 160$  K, so dass das Gas durch HD über die Teilchen im hochenergetischen Teil der Maxwellverteilung auf bis zu etwa einer Größenordnung tiefer gekühlt werden kann als durch H<sub>2</sub>. Hinzu kommt, dass die Übergangswahrscheinlichkeit mit  $A \approx 10^{-8} \text{ s}^{-1}$  die von H<sub>2</sub> um etwa das Tausendfache übertrifft.

Auch für HD wurde die Kühlfunktion als Fortranroutine im Rahmen des Collaborative Computational Project [11] veröffentlicht (Flower et al. [18]).

### Kühlung durch LiH

Die Chemie von LiH ist komplex; bei  $T \gtrsim 2000$  K wird es über angeregte Zustände gebildet; erst ab  $T \approx 2000$  K über direkte radiative Assoziation.

Das Dipolmoment von LiH ist verhältnismäßig groß, daher kommen starke Rotations- und Schwingungsübergänge vor, allerdings ist die Datenlage für Rotations- und Schwingungsübergänge spärlich.

Die primordiale Häufigkeit von Li bzw. LiH ist nicht unumstritten (letztere dürfte bei ca.  $10^{-18}$  liegen). Falls der LiH-Beitrag zur Gesamtkühlung durch Linien relevant ist, dann nur bei geringeren Temperaturen als der Beitrag von HD.

### Zusammenhang zwischen Kühlung und Strukturbildung

Erst als die Kühlzeit kleiner als die Hubblezeit wurde, konnten sich die ersten Strukturen im frühen Universum bilden. Gemeint sind hiermit Strukturen baryonischer Materie. Die Rolle und das Verhalten von dunkler Materie und ihre Wechselwirkung mit der baryonischen Materie sind nicht Gegenstand der hier vorgelegten Arbeit. Die dunkle Materie hat Simulationsrechnungen zu Folge zwar eine wichtige Rolle bei der Bildung und dem Verhalten der ersten, filamentartigen Strukturen gespielt. Der dynamische Beitrag der dunklen Materie zur Entstehungszeit der ersten Sterne ist jedoch vernachlässigbar. Erst wenn die Kühleigenschaften des Gases, dessen chemischer Beitrag im Wesentlichen durch die  $H_2$ -Konzentration festgelegt wird, bekannt sind, können Aussagen über die Umstände bei der Bildung der ersten Strukturen im Universum gemacht werden.

Laut Norman, Abel und Bryan [40] liegt der kritische  $H_2$ -Anteil, der eine ausreichend effiziente Kühlung ermöglichen würde, bei  $f_{H_2} \approx 5 \cdot 10^{-4}$ . Demnach könnten bei einer Rotverschiebung von  $z \approx 40$  erste Objekte mit  $M \gtrsim 5 \cdot 10^4 M_\odot$  entstanden sein, wahrscheinlicher wäre der Kollaps und Kühlung von Objekten mit  $M \gtrsim 5 \cdot 10^5 M_\odot$  bei  $z \approx 25$ . Auch Simulationsrechnungen zur kosmologischen Strukturbildung (z.B. Abel et al. [2], [1] Bromm et al. [9] teilweise Tegmark et al. [61]) ergaben Zahlen, die in ähnlicher Größenordnung liegen.

## 3.6 Chemisches Netzwerk

Um die Häufigkeiten der chemischen Spezies berechnen zu können, müsste ein Netzwerk von Ratengleichungen der Form (ohne Advektion)

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i}{\partial t} = & \sum_j \sum_k k_{ijk} n_j n_k + \sum_l \sum_m \sum_n k_{ilmn} n_l n_m n_n \\ & + \sum_{o \neq p} n_{i,o} (A_{i,op} + B_{i,op} J_{op}(T_{\text{rad}}) + C_{i,op}(T)) \\ & - n_{i,p} \sum_{o \neq p} (A_{i,op} + B_{i,op} J_{op}(T_{\text{rad}}) + C_{i,op}(T)) \end{aligned}$$

gelöst werden. Die erste Zeile der rechten Seite beschreibt die zeitliche Entwicklung der Gesamtteilchendichte  $n_i$  der chemischen Spezies  $i$ . Bei Zweiteilchenreaktionen erfolgt die Reaktion der Spezies  $j$  und  $k$  mit einem Ratenkoeffizienten  $k_{ijk}$  um Spezies  $i$  auf- bzw. abzubauen. Bei Dreiteilchenreaktionen erfolgt der Auf- bzw. Abbau der Spezies  $i$  durch Reaktion der Spezies  $l$ ,  $m$  und  $n$  mit dem Ratenkoeffizienten  $k_{ilmn}$ . Die zweite und dritte Zeile sind erforderlich, falls Informationen bzgl. der Besetzung der Rotations- und Vibrationszustände (z.B. für die Modellierung der Linienemission) benötigt werden.  $A_{i,op}$  und  $B_{i,op}$  sind hier die spontane und stimulierte Übergangswahrscheinlichkeit,  $C_{i,op}$  die stoßinduzierte Übergangswahrscheinlichkeit der Spezies  $i$  zwischen den Zuständen  $o$  und  $p$ .  $J_{op}$  steht für Intensität des Strahlungsfeldes.

Die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Teilchendichte und der Besetzungszustände können nicht entkoppelt und müssen selbstkonsistent gelöst werden. In dieser Arbeit wird, wie in den meisten Modellen, angenommen, dass die Verteilung der Rotations- und Vibrationszustände sich im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) befinden bzw. sich die Teilchen im Grundzustand befinden. Diese Annahme ist i.a. gerechtfertigt, davon abgesehen, dass über die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Rotations- und Vibrationsniveaus oft wenig bekannt ist. Somit hat das in dieser Arbeit implementierte chemische Netzwerk die Form

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \sum_j \sum_k k_{ijk} n_j n_k + \sum_l \sum_m \sum_n k_{ilmn} n_l n_m n_n - \nabla \cdot (n_i u). \quad (3.6)$$

Der zweite Term ist der Advektionsterm. Diese Gleichung ergibt einen Satz gekoppelter, steifer Differentialgleichungen (eine je Spezies).

Üblicherweise werden die Ratenkoeffizienten in der sog. Arrheniusform

$$k = A \cdot T^B \cdot \exp [C/T] \quad (3.7)$$

angegeben. Die Reaktionen des Ratennetzwerks sind einschließlich Ratenkoeffizienten und Quellenangaben in Anhang B aufgelistet.

Die Reaktionsraten sind dichte- und temperaturabhängig. Deswegen ist zur Berechnung der Molekülhäufigkeiten die simultane und zeitabhängige Lösung des chemischen Netzwerks nebst Dichte- und Temperaturentwicklung nötig. Für einige Reaktionen sind die Reaktionskoeffizienten nicht besonders gut bekannt; ihre Berechnung ist sehr aufwendig, die Messung bei niedrigen Temperaturen und Dichten oft unmöglich. Da Moleküle sowohl zur Heizung als auch zur Kühlung des Gases beitragen können (Abschnitt 3.5), ist die chemische Entwicklung an die Entwicklung der Umgebung gekoppelt und umgekehrt.

Die Zeitskala der chemischen Entwicklung hängt von Temperatur und Dichte des Gases ab<sup>9</sup>. Typische Werte liegen im Bereich

$$t_{\text{chem}} = 10^{-9}, \dots, 10^{13} \text{ s} \quad (3.8)$$

was eine extreme Steifigkeit des Gleichungssystems (s. auch Abschnitt 2.1.2) zur Folge hat.

---

<sup>9</sup>Ein gutes Beispiel sind die Dreiteilchenstöße, die zur Bildung von  $\text{H}_2$  führen (Abschnitt 3.4.2): Bei niedriger Teilchendichte ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich drei H-Atome zur gleichen Zeit am gleichen Ort aufhalten verschwindend klein, während bei Teilchendichten ab  $n \gtrsim 10^8 \text{ cm}^{-3}$  diese Art von Reaktionen zu den schnellsten gehören, die in der Gasphase stattfinden.

## Kapitel 4

# Numerisches Verfahren

In diesem Abschnitt sollen die numerischen Methoden, die zur Diskretisierung und zur Zeitintegration des in Abschnitt 2.2 vorgestellten Gleichungssystems verwendet werden, erläutert werden.

### 4.1 Zeitintegration mit LIMEX

Zur Integration des Gleichungssystems ((2.3)–(2.11)) wird das Integratorpaket LIMEX (Linear **IM**plicit Euler Method with **EX**trapolation) in der Version 4.3B aus dem Jahr 2002 [15], das im Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik in Berlin von R. Ehrig und U. Nowak entwickelt wird, benutzt.

LIMEX ist ein black box-Verfahren zur Lösung linear-impliziter differenzial-algebraischer Systeme (DAEs) der Form

$$\mathbf{B}(t, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{y}'(t) = f(t, \mathbf{y}). \quad (4.1)$$

$\mathbf{B}$  ist eine  $n \times n$  Matrix, wobei  $n$  die Größe des Systems ist.  $\mathbf{B}$  darf auch singulär sein, da auch algebraische Gleichungen gelöst werden können.  $\mathbf{y}$  ist der Vektor der Unbekannten,  $\mathbf{y}'$  seine Zeitableitung und  $f(t, \mathbf{y})$  die rechte Seite des Systems. Vom Benutzer sind  $\mathbf{B}$ , der Anfangswert von  $\mathbf{y}$  und  $f(t, \mathbf{y})$  anzugeben.

LIMEX arbeitet mit einer linear-impliziten Eulerdiskretisierung der Form

$$(\mathbf{B}(t_n, \mathbf{y}_n) - h\mathbf{J}) \cdot (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) = hf(t_{n+1}, \mathbf{y}_n). \quad (4.2)$$

Der Index  $n$  bezieht sich auf den Zeitpunkt  $t_n$ ,  $n + 1$  entsprechend auf den Zeitpunkt  $t_{n+1}$ ;  $h$  bezeichnet die Zeitschrittweite.

$$\mathbf{J} = \left. \frac{d}{d\mathbf{y}}(f - \mathbf{B}\mathbf{y}') \right|_{t=t(0)}$$

ist die Jacobimatrix des Residuums.

LIMEX ist ein Einschrittverfahren, das in Kombination mit einer Extrapolation  $h \rightarrow 0$  eine adaptive Kontrolle von Zeitschrittweite und Ordnung erlaubt. LIMEX eignet sich besonders für große<sup>1</sup> und steife Systeme.

Die Effizienz des Verfahrens hängt hauptsächlich von performance und Genauigkeit bei der Berechnung der Jacobimatrix ab. Diese kann wahlweise von LIMEX numerisch approximiert, oder vom Benutzer analytisch angegeben werden. Die Angabe analytischer Ableitungen verbessert das Verhalten des Verfahrens deutlich; deshalb wird in dieser Arbeit LIMEX mit einem Verfahren zur automatischen analytischen Differenziation, das von Christian Straka<sup>2</sup> freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurde, kombiniert.

Eine wichtige Einschränkung bei der Benutzung von LIMEX besteht darin, dass für den Vektor der Unbekannten bzw. der rechten Seite gelten muss:

$$\frac{|\mathbf{y}|_{max}}{|\mathbf{y}|_{min}} < 10^5 \quad (4.3)$$

$$\frac{|\mathbf{f}|_{max}}{|\mathbf{f}|_{min}} < 10^{20} \quad (4.4)$$

da ansonsten das Verfahren aufgrund von numerischen Auslöschungseffekten nicht mehr zuverlässig funktioniert. Wie in Abschnitt 2.1.2 angedeutet, ist davon auszugehen, dass im Laufe einer Simulationsrechnung die Werte der physikalischen Variablen nicht innerhalb dieser Schranken bleiben werden. Eine Möglichkeit diese Restriktion zu umgehen ist die Logarithmierung der Variablen. Bei Größen wie der radialen Geschwindigkeit, die ihr Vorzeichen ändern, wäre diese Vorgehensweise unmöglich, vor allem würde aber durch die Logarithmierung der Variablen die Erhaltungsform der Gleichungen aufgegeben werden, was für die numerische Behandlung nicht zweckmäßig wäre. In dieser Arbeit wurden daher die physikalischen Größen  $\tilde{x}$  mit einem Skalierungsfaktor  $x_0$  normiert:

$$\tilde{x} := x \cdot x_0 \Leftrightarrow x = \frac{\tilde{x}}{x_0}$$

und mit den skalierten Größen  $x$  gerechnet.

Falls nötig, wurden die Skalierungsfaktoren im Laufe der Rechnung angepasst, um sicherzustellen, dass weder der skalierte Vektor der Unbekannten noch die skalierte rechte Seite die Bedingungen (4.3) und (4.4) verletzen. Eine (zu) häufige Renormierung und der damit verbundene Neustart der Rechnung wirken sich auf die performance (und evtl. Stabilität der Rechnung) negativ aus, da Informationen aus der Vorgängerlösung verloren gehen und die Interpolation neu starten muss.

Der Einsatz eines black-box-Verfahrens hat den Nachteil, dass dem Benutzer die Details der Implementierung verborgen bleiben, wodurch das Lokalisieren von Fehlern erschwert wird. Auch kann das Verfahren nur sehr eingeschränkt den Erfordernissen des Problems angepasst werden (eher ist das Gegenteil der Fall). Dafür sind andererseits keine Eingriffe in das Integrationsverfahren nötig (wie z.B. das Aufstellen oder Anpassen der Jacobimatrix), falls das Gleichungssystem modifiziert wird.

---

<sup>1</sup>das Verfahren soll problemlos mit Gleichungssystemen mit  $10^5, \dots, 10^6$  Unbekannten, wie sie in Fragestellungen der Chemie nicht unüblich sind, zurechtkommen.

<sup>2</sup>Persönliche Mitteilung



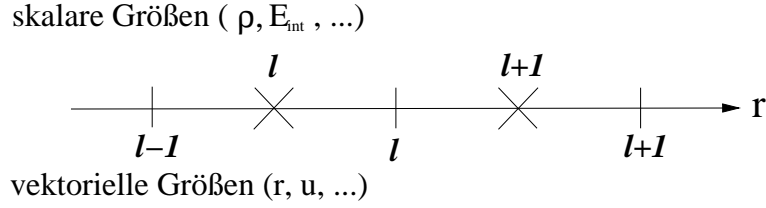


Abbildung 4.1: Gestaffeltes Gitter

## 4.2 Räumliche Diskretisierung

Die zeitliche Diskretisierung wird von LIMEX übernommen, nicht aber die räumliche. Dabei sind die zu lösenden Gleichungen aus dem Abschnitten 2.2 und 3.6 so umzuformulieren, dass sie in einer geeigneten Form für die numerische Behandlung auf einem (adaptiven) Gitter vorliegen. Die globalen Erhaltungseigenschaften der Strukturgleichungen sollen in der numerischen Rechnung so weit wie möglich erhalten bleiben.

Es wird eine implizite Diskretisierung benutzt, da diese im Gegensatz zu einem expliziten Verfahren nicht durch die Courant-Friedrichs-Levi-Bedingung (CFL-Bedingung), die einen Zusammenhang zwischen der räumlichen Unterteilung und dem maximal erreichbaren Zeitschritt herstellt, unterliegt. Bei einem expliziten Schema ist die Stabilität des Verfahrens garantiert, wenn gilt:

$$t_{CFL} < \min_{\text{Gitter}} \frac{\Delta r}{c_s + |u^{\text{rel}}|} \quad (4.5)$$

$$\text{Courantzahl } N_{CFL} = \frac{\delta t}{t_{CFL}} \quad (4.6)$$

Ein explizites Schema verlangt immer  $N_{CFL} \leq 1$ , d.h. der Zeitschritt fällt mit steigender räumlicher Auflösung und höheren (lokalen) Schall- und Relativgeschwindigkeiten  $c_s$  und  $u^{\text{rel}}$ . Für implizite Verfahren ist kein allgemein gültiger, streng mathematischer Konvergenzbeweis bekannt.

Die räumliche Diskretisierung wird auf einem gestaffelten Gitter mit  $N$  Gitterpunkten durchgeführt, bei dem skalare Größen (wie Druck, innere Energie) in der Zellenmitte, vektorielle Größen (z.B. radiale Geschwindigkeit, Ortskoordinate) am Zellenrand definiert sind (siehe Abbildung 4.1).

Der Gitterindex  $l$  läuft von innen ( $l = 1$ ) nach außen ( $l = N$ ), so dass für die Ortskoordinate gilt:  $r_{in} = r_1 < r_2 < \dots < r_N = R_{\text{tot}}$ . Im Folgenden wird zur Abkürzung die Notation

$$\Delta x_l := x_l - x_{l-1} \quad \text{räumliche Differenz} \quad (4.7)$$

$$x_{l\pm 1/2} := \frac{1}{2}(x_l + x_{l\pm 1}) \quad \text{Mittelwert} \quad (4.8)$$

benutzt.

Die Erhaltungsform der diskretisierten Gleichungen erhält man, indem man die Ausgangsgleichungen in Integralform schreibt, z.B. bei der Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{d}{dt} \left[ \int_{V(t)} \rho d\tau \right] = - \int_{\partial V} \rho(u^{\text{rel}} d\mathbf{S}) \quad (4.9)$$

## 4.2. RÄUMLICHE DISKRETISIERUNG

---

in Worten: Die Änderung der Gesamtmasse im abgeschlossenen Volumen  $V(t)$  (dieses kann zeitlich variieren) ist gleich dem Massengewinn bzw. -verlust durch die orientierte Oberfläche  $\partial V$  des Volumens durch den Massenfluss  $\rho \mathbf{u}^{rel}$  relativ zum (bewegten) Koordinatensystem.  $d\tau$  und  $d\mathbf{S}$  stehen für die Volumen- bzw. orientierten Oberflächenelemente.

Vertauscht man nun Differenziation und Integration und wendet den Gausschen Integralsatz an, erhält man:

$$\int_V \left[ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] d\tau = 0. \quad (4.10)$$

Da  $V$  beliebig ist, muss der Integrand verschwinden. Entsprechend verfährt man mit den restlichen Gleichungen. Da diese Manipulationen rein analytisch waren, ist das hiermit erhaltene Gleichungssystem dem im Abschnitt 2.2 aufgestellten äquivalent. Die Integraldarstellung wird nun benutzt, um zur diskretisierten Form der Gleichungen zu gelangen, indem man von einem Volumen  $V$ , das von zwei benachbarten Gitterzellen eingeschlossen wird, ausgeht (daher wird dieses Verfahren Methode der finiten Volumenelemente genannt).

Das **durch  $4\pi$  dividierte Volumen  $\Delta V_l$**  einer sphärischen Zelle zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten zwischen den Radien  $r_l$  und  $r_{l-1}$  ist

$$\Delta V_l = \frac{1}{3} (r_l^3 - r_{l-1}^3). \quad (4.11)$$

Der diskretisierte Volumenterm ergibt damit

$$\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{d}{dt} \left[ \int \rho d\tau \right]_l \approx \frac{\delta(\rho_l \Delta V_l)}{\delta t}. \quad (4.12)$$

Der diskretisierte Gradient einer Größe  $X$  lautet

$$\int_V \nabla X d\tau \Big|_l = r_l^2 \Delta(X_l). \quad (4.13)$$

Die Divergenz von  $X$  erhält man wieder über den Gausschen Satz:

$$\int_V \nabla \cdot X d\tau \Big|_l = \Delta(r_l^2 X_l). \quad (4.14)$$

### 4.2.1 Advektion

Der Oberflächenterm auf der rechten Seite von Gleichung (4.9), der sog. Advektionsterm, erfordert besondere Aufmerksamkeit: er beschreibt, wie eine physikalische Größe von einer Gitterzelle in die benachbarte transportiert wird. Die Formulierung der Gleichungen in Erhaltungsform stellt sicher, dass jeder Gewinn bzw. Verlust durch Transport in eine Gitterzelle hinein bzw. heraus durch eine entsprechende Abnahme bzw. Zunahme in der benachbarten Gitterzelle kompensiert wird.

Physikalisch plausibel sind sog. Aufwindverfahren; hier werden die Gradienten physikalischer Größen so advektiert, dass nur Zellen, aus denen der Fluss kommt, beteiligt sind.

Bei überschallschnellen Flüssen wird also keine Information gegen den Fluss transportiert. Diese Verfahren sind in der Regel numerisch stabil.

Das am einfachsten zu handhabende, dafür nicht sehr genaue (1. Ordnung) Verfahren ist das **donor cell-Verfahren**

$$\frac{1}{4\pi} \left[ \int_{\partial V} \rho(u^{rel} \cdot d\mathbf{S}) \right]_l \approx \Delta(r_l^2 u_l^{rel} \rho_l^{ad}) \quad (4.15)$$

mit

$$\rho_l^{ad} = \begin{cases} \rho_l & \text{falls } u_l > 0 \\ \rho_{l+1} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.16)$$

Der Massenfluss  $f$  wird als  $f_l := r_l^2 u_l \cdot \rho_l^{ad}$  definiert. Analog erhält man damit für die Geschwindigkeit

$$u_{l+1/2}^{ad} := \begin{cases} u_l & \text{falls } f_{l+1/2} > 0 \\ u_{l+1} & \text{falls } f_{l+1/2} \leq 0. \end{cases} \quad (4.17)$$

Ein (nominell) genaueres Verfahren ist das **van-Leer-Verfahren**, ein monotones Interpolationsschema 2. Ordnung in den räumlichen Differenzen. Für die zu interpolierende Größe  $X$  wird

$$dX_l := \begin{cases} \frac{\Delta X_l \Delta X_{l+1}}{\Delta X_l + \Delta X_{l+1}} & \text{falls } \Delta X_l \Delta X_{l+1} > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.18)$$

definiert ( $\Delta X_l := X_l - X_{l-1}$ ). Die advektierte Größe  $X_{ad}$  lautet damit:

$$X_l^{ad} := \begin{cases} X_l + dX_l & \text{falls } u_l > 0 \\ X_{l+1} - dX_{l+1} & \text{falls } u_l \leq 0. \end{cases} \quad (4.19)$$

In dieser Arbeit wurde das donor-cell-Verfahren benutzt, weil damit die besseren Ergebnisse erzielt werden konnten.

## 4.2.2 Künstliche Viskosität

Die Entstehung und Ausbreitung von Stoßfronten (Diskontinuitäten) ist eine allgemeine Eigenschaft von Strömungen. Diskontinuitäten können nicht mit Differenzenschemata behandelt werden, weil finite Differenzen nur so lange eine gute Näherung darstellen, wie die physikalischen Variablen gewisse Kontinuitäts- und Differenzierbarkeitseigenschaften vorweisen (nicht zu steile Gradienten, stetige 2. Ableitungen).

In der Praxis wird daher die Stoßfront mit Hilfe einer künstlichen Viskosität über mehrere Gitterzellen ausgeschmiert. Das ursprüngliche Verfahren von v. Neumann und Richtmyer [67] war auf ebene Geometrien beschränkt und wurde von Tscharnuter und Winkler [63] auf eine koordinatenunabhängige Form verallgemeinert, indem der viskose Druck durch den viskosen Drucktensor ersetzt wurde. Die Grundidee besteht darin, den physikalischen Druck durch einen viskosen Druck zu ergänzen, so dass folgende Bedingungen erfüllt werden:

## 4.2. RÄUMLICHE DISKRETISIERUNG

---

1. Stoßfronten werden gemäß einer bestimmten Längenskala verbreitert; diese entspricht bei festem Gitter der lokalen Maschenweite, bei einem adaptiven Gitter einer a priori festgelegten Längenskala.
2. Sich in der Strömung ausdehnende Regionen müssen frei von künstlicher Viskosität sein.
3. Durch die diskrete Struktur der finiten Differenzen soll keine Störung des Gleichgewichts beim Übergang vom freien Überschallfluss in eine quasihydrostatische Region hervorgerufen werden.
4. Eine sphärisch symmetrische, homologe Kontraktion (z.B.  $u \sim r$ ) darf von der künstlichen Viskosität nicht beeinflusst werden.

Diese Forderungen werden vom Drucktensor  $\mathbf{Q}$  erfüllt:

$$\mathbf{Q} = \mu_Q \left[ (\nabla \mathbf{u}) - \frac{1}{3} \nabla \cdot u \mathbf{I} \right] \quad (4.20)$$

(mit  $(\nabla \mathbf{u})$  symmetrisierter Geschwindigkeitsgradient,  $\mathbf{I}$  Einheitstensor).

Damit lauten der viskose Impulsübertrag  $w_Q$  und die viskose Energiedissipation  $\epsilon_Q$ :

$$w_Q = - \nabla \cdot \mathbf{Q} \quad (4.21)$$

$$\epsilon_Q = - \frac{1}{\rho} \mathbf{Q} \cdot (\nabla \mathbf{u}). \quad (4.22)$$

Der Koeffizient der künstlichen Viskosität  $\mu_Q$  setzt sich aus einem linearen und einem quadratischen Term zusammen, deren Beitrag zur künstlichen Viskosität sich über die Parameter  $q_1$  und  $q_2$  steuern lassen:

$$\mu_Q = -q_1 l_{visc} c_s + (q_2 l_{visc})^2 \min(\nabla \cdot u, 0). \quad (4.23)$$

Der lineare, zu  $c_s$  proportionale Term dämpft kleine Oszillationen in der Nähe von Kontaktdiskontinuitäten, der zweite ist quadratisch in  $l_{visc}$ , der typischen viskosen Längenskala. Die Größe von  $l_{visc}$  ist bei adaptiver und nichtadaptiver Formulierung unterschiedlich:

- *Nichtadaptiv*: Die künstliche Viskosität muss proportional zur typischen Zellengröße  $\Delta x$  sein,  $q_2$  gibt an, über wie viele Zellen der Stoß ausgeschmiert wird, d.h. der Stoß wird auf einer Größenordnung, die der Gitterskala entspricht, aufgelöst.
- *Adaptiv*: Das Gitter zieht sich an der Diskontinuität zusammen, also sind kleinere  $l_{visc}$  möglich. Bei Anwendung eines adaptiven Gitters in Kombination mit einem impliziten Verfahren ist  $l_{visc}$  a priori festlegbar und definiert die Längenskala, über die der Stoß verbreitert werden soll: Das Gitter zieht sich zusammen und löst Strukturen der Größe  $l_{visc}$  auf, d.h. die Breite der Stoßfront ist a priori festlegbar und unabhängig von der anfänglichen Gitterauflösung  $\Delta x$ .

Diskretisiert sieht  $\mu_Q$  folgendermaßen aus:

$$\mu_{Q,l} = -q_1 l_{visc} \bar{r} c_{s,l} + q_2^2 (\bar{r} l_{visc})^2 \min\left(\frac{\Delta(r_l^2 u_l)}{\Delta V_l}, 0\right), \quad (4.24)$$

wobei  $l_{visc}$  gemäß dem benutzten Gitter zu wählen ist. Diese Formulierung und Vorgehensweise entspricht der von Dorfi in [14] gewählten.

### 4.3 Adaptives Gitter

Bei der numerischen Lösung von Systemen von Differenzialgleichungen bzw. DAEs sind Lage und Anzahl von Gitterpunkten nicht immer über den gesamten Integrationszeitraum optimal; insbesondere dann nicht, wenn sich im Laufe der Rechnung veränderliche Strukturen (z.B. wandernde Stoßfronten) ausbilden, oder die physikalischen Variablen über viele Größenordnungen variieren, wie es bei astrophysikalischen Problemen oft der Fall ist. Ebenso ist es wünschenswert, die Diskretisierungsfehler innerhalb bestimmter Toleranzen zu halten. Diese Schwierigkeiten können durch eine Anpassung des Gitters entschärft werden, wobei es im Grunde zwei Möglichkeiten gibt:

1. Statisches Regriding: Die Anzahl der Gitterknoten wird so verändert, dass das Gitter dem Problem möglichst gut angepasst ist.
2. Dynamisches Regriding: Die Anzahl der Gitterknoten ist fest, sie werden in die kritischen Bereiche bewegt.

Durch den Einsatz eines adaptiven Gitters lassen sich Effizienz und Robustheit des numerischen Lösungsverfahrens steigern, wodurch nicht zuletzt auch das Zeitschrittverhalten positiv beeinflusst wird.

Es wurden zwei Ansätze, die jetzt kurz beschrieben werden, implementiert:

#### Adaptives Gitter nach Nowak

In der ursprünglichen Fassung handelt es sich um eine Kombination aus statischem und dynamischem Regriding, das von Nowak im Programmpaket PDEX1M (**P**arabolic **D**ifferential **E**quation **eX**trapolation solver in **1-D** with (optionally) **M**oving grid techniques) implementiert und in Nowak[41] ausführlich dokumentiert wurde. Ein Reiz dieses Ansatzes besteht darin, dass PDEX1M auf LIMEX basiert und daher optimal auf LIMEX abgestimmt sein sollte.

Das statische Regriding dient in erster Linie dazu, die Diskretisierungsfehler innerhalb vorgegebener Schranken zu halten, indem bei zu großem Fehler Gitterpunkte eingefügt und bei hinreichend kleinem Fehler Gitterpunkte entfernt werden. Dazu sind in PDEX1M ausgeklügelte Fehlerschätzer implementiert worden. Da man bei der Verwendung von LIMEX im Laufe einer Rechnung keinen Einfluss auf den Diskretisierungsfehler hat, wurde nur der Teil zum dynamischen Regriding benutzt. Die Anzahl der Gitterpunkte sollte auch deshalb unverändert bleiben, weil statisches Regriding nicht

### 4.3. ADAPTIVES GITTER

---

nur die Größe des Gleichungssystems ändert (und damit bei LIMEX ein Neuaufsetzen der Rechnung mit allen erwähnten Nachteilen erzwingt), sondern auch Interpolationen auf das neue Gitter erfordert, die insbes. bei Zustandsgrößen nur schwer zu handhaben wären.

Zur besseren Übersichtlichkeit werden in diesem Abschnitt die üblichen Abkürzungen  $\dot{y}$  für die totale Zeitableitung von  $y$  und  $y_r$  für die partielle Ableitung der Variablen  $y$  nach  $r$  benutzt.

Der Ansatz ist folgender: Wird die Ortskoordinate  $r$  zeitlich variabel, stimmen partielle und totale Zeitableitung der Unbekannten  $y$  nicht mehr überein, sondern es gilt:

$$r \rightarrow r(t) \Rightarrow \dot{y} = y_r \dot{r} + y_t. \quad (4.25)$$

In das Gleichungssystem eingesetzt bedeutet dies:

$$B(y)y_t = f(y) \rightarrow B(y)(\dot{y} - y_r \dot{r}) = f(y). \quad (4.26)$$

Formal ist das neue System nur mit Gleichungen zur Bestimmung der neuen abhängigen Variablen  $r(t) := (r_1(t), \dots, r_N(t))$  lösbar. Ziel des Verfahrens ist es, die Dynamik im neuen Koordinatensystem zu minimieren, deshalb wird das Gitter so bewegt, dass die zeitliche Änderung der Lösung an den Gitterknoten minimal wird, d.h.  $\dot{r}$  wird so gewählt, dass die Zeitableitung des Gesamtsystems  $\dot{w} := (\dot{y}, \dot{r})^T$  minimal wird:

$$\dot{w} := \begin{pmatrix} \dot{y} \\ \dot{r} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{aligned} \|\dot{w}\|^2 = \dot{w}^T \dot{w} &\stackrel{!}{=} \min \\ \dot{y}^T \dot{y} + \dot{r}^T \dot{r} &\stackrel{!}{=} \min \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\Rightarrow \min_{\dot{r}} \{\dot{y}^T \dot{y} + \alpha \dot{r}^2\} = \min_{\dot{r}} \{(y_t + y_r \dot{r})^T (y_t + y_r \dot{r}) + \alpha \dot{r}^2\}. \quad (4.28)$$

Die Lösung des Minimierungsproblems ergibt eine Bedingungsgleichung zur Bestimmung von  $r(t)$ :

$$(y_t + y_r \dot{r})^T y_r + \alpha \dot{r} = 0,$$

wobei  $\alpha$  ein freier Parameter ist. Mit  $\dot{y} = y_t + y_r \dot{r}$  erhält man die Gitterbewegungsgleichung

$$\dot{y}^T y_r + \alpha \dot{r} = 0. \quad (4.29)$$

Das zu lösende System hat linear implizite Struktur:

$$\tilde{B}(w)\dot{w} = \tilde{f}(w) \quad \text{mit} \quad \tilde{B} = \begin{pmatrix} B & -By_x \\ y_r^T & \alpha \end{pmatrix}, \quad \tilde{f} = \begin{pmatrix} f(y) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

In dieser Form ist noch keine Monotonie des Gitters garantiert. Sie wird durch die Forderung nach umso kleinerer Geschwindigkeitsdifferenz benachbarter Knoten, je näher diese aneinander liegen, erreicht: das Funktional

$$\sum_{l=1}^N \left\| \frac{\dot{r}_l - \dot{r}_{l-1}}{r_l - r_{l-1}} \right\|^2 \quad (4.31)$$

wird minimiert

$$\Rightarrow \frac{\dot{r}_l - \dot{r}_{l-1}}{(r_l - r_{l-1})^2} - \frac{\dot{r}_{l+1} - \dot{r}_l}{(r_{l+1} - r_l)^2} = 0. \quad (4.32)$$

Der Ausdruck auf der linken Seite obiger Gleichung entspricht der Ortsdiskretisierung von  $-\dot{r}_{rr}$  für die inneren Gitterpunkte  $l = 2, \dots, N-1$ . Dies ausnutzend, kann die Gittergleichung für die inneren Punkte folgendermaßen formuliert werden:

$$\dot{y}^T y_r + \alpha \dot{r} - \lambda \dot{r}_{rr} = 0 \quad (\alpha, \lambda \text{ freie Parameter}). \quad (4.33)$$

In das Gesamtsystem eingesetzt:

$$B \cdot (\dot{y}_l - (\Delta_r y_l) \dot{r}) = f_l \quad (4.34)$$

$$\dot{y}_l^T (\Delta_r y_l) - \lambda (\Delta_{rr} \dot{r}_l) = 0. \quad (4.35)$$

( $\Delta_r y_l$  ist die diskretisierte Ableitung von  $y$  nach  $r$  am Gitterindex  $l$ ).

Außerdem wird eine Randbedingung für die Randpunkte  $l = 1, l = N$  benötigt, z.B.:

$$\dot{r}_1 = \dot{r}_N = 0. \quad (4.36)$$

Einbindung in das Gesamtverfahren: Der neue Vektor der Unbekannten am Index  $l$   $w_l := (y_l, r_l)^T$ ,  $l = 1, \dots, N$  wird zum Gesamtvektor  $\mathbf{w}(t) := (w_1(t), \dots, w_N(t))^T$  zusammengefasst.

Damit kann das zu integrierende Gesamtsystem

$$\tilde{\mathbf{B}}(t, \mathbf{w}(t)) \cdot \dot{\mathbf{w}}(t) = \tilde{\mathbf{f}}(t, \mathbf{w}(t)) \quad (4.37)$$

wie folgt geschrieben werden:

Die Matrix  $\tilde{\mathbf{B}}$  hat folgende Form:

Innere Punkte ( $l = 2, \dots, N-1$ )

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}}_{l,l} &= \begin{pmatrix} \mathbf{B}_l & \mathbf{B}_l(\Delta_r y_l) \\ (\Delta_r y_l)^T & b_l^M \end{pmatrix} & b_l^M &= \frac{2\lambda}{(r_{l+1} - r_l)(r_l - r_{l-1})} \\ \tilde{\mathbf{B}}_{l,l-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & b_l^L \end{pmatrix} & b_l^L &= \frac{-2\lambda}{(r_{l+1} - r_{l-1})(r_l - r_{l-1})} \\ \tilde{\mathbf{B}}_{l,l+1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & b_l^R \end{pmatrix} & b_l^R &= \frac{-2\lambda}{(r_{l+1} - r_{l-1})(r_{l+1} - r_l)}. \end{aligned}$$

Am Rand ( $l = 1, N$ )

$$\tilde{\mathbf{B}}_{1,1} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_1(\Delta_r y_1) \\ (\Delta_r y_1)^T & 1 \end{pmatrix} \quad \tilde{\mathbf{B}}_{1,2} = \tilde{\mathbf{B}}_{N-1,N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0. \end{pmatrix}$$

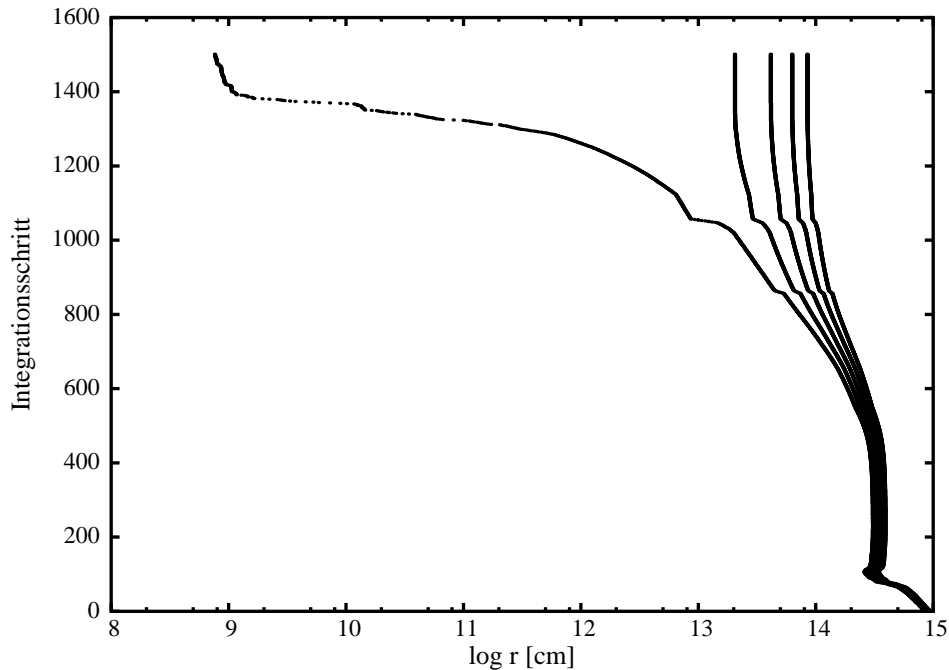


Abbildung 4.2: Auseinanderlaufen der inneren Gitterpunkte bei einer Kollapstestrechnung. Aufgetragen ist die Änderung der Lage der innersten fünf Gitterpunkte im Laufe der ersten ca. 1500 Integrationsschritte, wobei der innerste Gitterpunkt so gewählt wurde, dass die Masse innerhalb der innersten Kugel konstant blieb.

Diese Verfahrensweise hat den formalen Vorteil, dass das bestehende System nicht verändert, sondern nur erweitert werden muss und nur ein freier Parameter  $\lambda$  anzupassen ist. Das Überkreuzen der Gitterpunkte ist zwar ausgeschlossen, es gibt aber keine Vorkehrung, die ein zu weites Auseinanderlaufen der Gitterpunkte verhindern würde. In Kombination mit statischem Regridding ist dies auch nicht nötig, weil Gitterpunkte eingefügt werden, sobald der Diskretisierungsfehler die vorgegebene Fehlerschranke überschreitet. Wird aber, wie hier, aus oben genannten Gründen auf statisches Regridding verzichtet, kann es vorkommen, dass der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten zu groß wird. Das führte bei Testrechnungen zu dem Verhalten, das in Abbildung 4.2 dargestellt ist.

Aus diesem Grund wurde dieser Ansatz nicht weiter verfolgt und durch den von Dorfi & Drury ersetzt, der im folgenden Abschnitt beschrieben wird.

### Adaptives Gitter nach Dorfi & Drury

Dieser Ansatz geht auf Dorfi und Drury [13] zurück und wurde ursprünglich entwickelt, um steile, sich bewegende Stoßfronten besser auflösen zu können. Das Gitter wird nicht a priori generiert, sondern ist Teil des zu lösenden Systems und passt sich durch Bewegung der Gitterpunkte an die Lösung an.

Die Gittergleichung soll folgenden Eigenschaften genügen:



1. Monotonie, d.h.  $r_{l-1}(t) < r_l(t) \forall t, l$ .
2. Konzentration der Gitterpunkte an relevanten Stellen. Bei Abwesenheit von Strukturen sollen die Gitterknoten automatisch gleichmäßig verteilt werden.
3. Das Gitter soll sich weder räumlich noch zeitlich abrupt ändern.

Die Vorgehensweise ist folgende:

Man definiert die Punktkonzentration  $n_l$  am Index  $l$  durch den Ausdruck:

$$n_l := \frac{\chi_l}{r_l - r_{l-1}}. \quad (4.38)$$

$\chi_l$  ist eine typische lokale Skala, die bei Abwesenheit von Strukturen die Gitterpunktverteilung festlegt; normalerweise hat  $\chi_l$  die Form

$$\chi_l = A + Br_l + Cr_{l-1}. \quad (4.39)$$

Durch die Wahl  $A = 0, B = C = 1/2$  wird ein logarithmisch äquidistantes Gitter erzeugt.

Die geforderte Auflösung  $\mathcal{R}$  wird normalerweise durch die Pfadlänge des Graphen der aufzulösenden Funktion  $f(r)$  festgelegt:

$$\mathcal{R} \sim \sqrt{1 + \left(\frac{df}{dr}\right)^2} \Rightarrow \mathcal{R}_l = \sqrt{1 + n_l^2 \cdot \sum_{j=1}^M g_j \left(\frac{f_{l,j} - f_{l-1,j}}{F_{l,j}}\right)^2} \quad (4.40)$$

$g_j$  sind Wichtungsfaktoren, die physikalischen Größen  $f_j$  (deren Anzahl ist  $M$ ) werden, falls nötig, durch die Faktoren  $F_j$  normiert. Die Funktion  $\mathcal{R}$  wird oft auch als Monitorfunktion  $\mathcal{M}$  bezeichnet.

Damit lautet eine einfache Form der Gittergleichung

$$n_l \sim \mathcal{R}_l. \quad (4.41)$$

wobei die Proportionalitätskonstante noch zu bestimmen ist. Diese Form würde instantan auf jede Veränderung reagieren, was numerisch ungünstig ist. Aus diesem Grund ist eine räumliche und zeitliche Glättung erforderlich:

- Räumliche Glättung: Die Variation der Punktkonzentration zwischen benachbarten Zellen wird durch einen freien Parameter  $\alpha_g$  beschränkt:

$$\frac{\alpha_g}{\alpha_g + 1} \leq \frac{n_l}{n_{l+1}} \leq \frac{\alpha_g + 1}{\alpha_g}.$$

Mit einem Wert von  $\alpha_g = 2$  wird die Veränderung der Zellengröße zwischen zwei Zeitschritten auf ca. 30% limitiert. Damit lautet die Gittergleichung mit räumlich geglätteter Punktkonzentration  $\hat{n}$

$$\hat{n}_l = n_l - \alpha_g(\alpha_g + 1)(n_{l+1} - 2n_l + n_{l-1}) \sim \mathcal{R}_l. \quad (4.42)$$

### 4.3. ADAPTIVES GITTER

---

- Zeitliche Glättung: Die Gitterbewegung wird über die exponentielle Zeitskala  $\tau_g$ , die etwas kürzer als die Zeitskala der kürzesten durch das Gitter aufzulösende Ereignisse sein sollte, gedämpft:

$$\mathcal{R} = \int_0^\infty \mathcal{R}(t-t') \exp[-t'/\tau_g] \frac{dt'}{\tau_g}.$$

Damit hätte die Gittergleichung die Form:

$$\tilde{n}_l = \hat{n}_l + \tau_g \delta_t \hat{n}_l, \sim \mathcal{R}_l \quad (4.43)$$

( $\delta_t$  ist die diskretisierte Version des Zeitableitungsoperators.)

Die Proportionalitätskonstante kann eliminiert werden, indem an zwei benachbarten Gitterpunkten das Verhältnis von geglätteter Punktkonzentration (Gleichung (4.43)) und Auflösung (Gleichung (4.40)) gleichgesetzt wird. Damit erhält man bereits die Endversion der Gittergleichung

$$\frac{\tilde{n}_l}{\mathcal{R}_l} = \frac{\tilde{n}_{l+1}}{\mathcal{R}_{l+1}}. \quad (4.44)$$

Diese Form der Gittergleichung führt zu einem 5-Punktschema ( $r_{l-2}, r_{l-1}, r_l, r_{l+1}, r_{l+2}$ ), d.h. es sind Randbedingungen an jeweils zwei Randpunkten nötig; üblicherweise  $n_2 = n_1$  und  $n_N = n_{N-1}$  bei  $N$  Punkten. Die Randpunkte  $r_1$  und  $r_N$  sind formal frei beweglich. Es gibt noch andere Wege, die Proportionalitätskonstante zu eliminieren (z.B. über das Produkt  $n\mathcal{R}$ ), die Form ((4.44)) hat sich jedoch laut Dorf [14] am besten bewährt.

## 4.4 Gesamtes Gleichungssystem in diskretisierter Form

Das diskretisierte Gleichungssystem für den strahlungshydrodynamischen Teil des Problems sieht also folgendermaßen aus:

Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\delta(\Delta V_l \rho_l)}{\delta t} = - (r_l^2 u_l \rho_l^{ad} - r_{l-1}^2 u_{l-1} \rho_{l-1}^{ad}) \quad (4.45)$$

Bewegungsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\Delta m_l u_l)}{\delta t} = & - (f_{l+1/2} u_{l+1/2}^{ad} - f_{l-1/2} u_{l-1/2}^{ad}) - r_l^2 (P_{l+1} - P_l) - \frac{4\pi G m_l \Delta m_l}{r_l^2} + \frac{4\pi}{c} \kappa_{l+1/2} H_l \Delta m_l \\ & - \frac{2}{3r_l} \left\{ r_l^3 \mu_{Q,l} \rho_l \left( \frac{u_{l+1} - u_l}{r_{l+1} - r_l} - \frac{u_{l+1/2}}{r_{l+1/2}} \right) - r_{l-1}^3 \mu_{Q,l-1} \rho_{l-1} \left( \frac{u_l - u_{l-1}}{r_l - r_{l-1}} - \frac{u_{l-1/2}}{r_{l-1/2}} \right) \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

Energiegleichung:

73

$$\begin{aligned} \frac{\delta(\Delta V_l \rho_l E_{th,l})}{\delta t} = & - (f_l E_{th,l}^{ad} - f_{l-1} E_{th,l-1}^{ad}) - P_l (r_l^2 u_l - r_{l-1}^2 u_{l-1}) - 4\pi \kappa_l \rho_l (J_l - S_l) \Delta V_l \\ & - \frac{2}{3} \mu_{Q,l} \rho_l \Delta V_l \left( \frac{u_l - u_{l-1}}{r_l - r_{l-1}} - \frac{u_{l-1/2}}{r_{l-1/2}} \right)^2 \\ & - \sum E_{ion,i} \left( \sum_j \sum_k k_{ijk,l} n_{j,l} n_{k,l} \cdot \Delta V_l + \sum_l \sum_m \sum_n k_{ilmn,l} n_{j,l} n_{k,l} n_{l,l} \cdot \Delta V_l \right) \\ & + \sum E_{diss,i} \left( \sum_j \sum_k k_{ijk,l} n_{j,l} n_{k,l} \cdot \Delta V_l + \sum_l \sum_m \sum_n k_{ilmn,l} n_{j,l} n_{k,l} n_{l,l} \cdot \Delta V_l \right) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Massengleichung:

$$0 = (m_l - m_{l-1}) - \Delta V_l \rho_l \quad (4.48)$$

Temperaturgleichung:

$$T_{neu} = T_{alt} - \left( \frac{E_{int}(T, \rho, n_i) - E_{int}}{dE_{int}(T, \rho, n_i)/dT} \right) \quad (4.49)$$

Strahlungsenergie (0. Moment):

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\delta(\Delta V_l J_l)}{\delta t} = & -\frac{1}{c} \left( \frac{f_l J_l^{ad}}{\rho_l^{ad}} - \frac{f_{l-1} J_{l-1}^{ad}}{\rho_{l-1}^{ad}} \right) - (r_l^2 H_l - r_{l-1}^2 H_{l-1}) - \frac{1}{c} K_l (r_l^2 u_l - r_{l-1}^2 u_{l-1}) \\ & + \frac{1}{c} (3K_l - J_l) \frac{u_{l-1/2}}{r_{l-1/2}} \Delta V_l - \kappa_l \rho_l (J_l - S_l) \Delta V_l \end{aligned} \quad (4.50)$$

Strahlungsfluss (1. Moment)

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\delta(\Delta V_{l+1/2} H_l)}{\delta t} = & -\frac{1}{c} (r_{l+1/2}^2 u_{l+1/2}^{ad} H_{l+1}^{ad} - r_{l-1/2}^2 u_{l-1/2}^{ad} H_l^{ad}) - r_l^2 (K_{l+1} - K_l) \\ & - \left( \frac{3K_{l+1/2} - J_{l+1/2}}{r_l} \Delta V_{l+1/2} \right) - \frac{1}{c} H_l (r_{l+1/2}^2 u_{l+1/2}^{ad} - r_{l-1/2}^2 u_{l-1/2}^{ad}) - \kappa_l H_l \Delta m_l \end{aligned} \quad (4.51)$$

Was das chemische Netzwerk anbelangt, wird die Diskretisierung der Gleichung (3.6) analog zu der der Kontinuitätsgleichung durchgeführt und liefert den Ausdruck:

$$\frac{\delta(\Delta V_l n_{i,l})}{\delta t} = \sum_j \sum_k k_{ijk,l} n_{j,l} n_{k,l} \cdot \Delta V_l + \sum_l \sum_m \sum_n k_{ilmn,l} n_{j,l} n_{k,l} n_{l,l} \cdot \Delta V_l - (r_l^2 u_l^{rel} n_l^{ad} - r_{l-1}^2 u_{l-1}^{rel} n_{l-1}^{ad}). \quad (4.52)$$

Der erste Term beschreibt den Auf- bzw. Abbau der Spezies  $i$  durch Reaktion der Spezies  $j$  und  $k$  am Gitterindex  $l$ . Bei Dreiteilchenreaktionen findet die Reaktion zwischen den Teilchensorten  $l$ ,  $m$  und  $n$  mit dem Ratenkoeffizienten  $k_{ilmn,l}$  statt, um am Gitterindex  $l$  Spezies  $i$  auf- bzw. abzubauen. Der dritte Term in Gleichung (4.52) ist der Advektionsterm. Diese Gleichungen entsprechen einer Kontinuitätsgleichung für die Teilchendichte jeder Spezies zuzüglich des Reaktionsterms. Wenn das chemische Netzwerk in dieser Form aufgeschrieben wird, kann die Kontinuitätsgleichung (4.45) für die Massendichte durch eine algebraische Gleichung der Form

$$0 = \rho_l - \sum_i n_{i,l} m_{At,i} m_u \quad (4.53)$$

ersetzt werden.  $m_{At,i}$  ist das Atomgewicht der Spezies  $i$ ,  $m_u$  die atomare Atommasseeinheit in Gramm.

# Kapitel 5

## Simulationsrechnungen

In diesem Kapitel wird zunächst die Wahl der Anfangsbedingungen erläutert und begründet, anschließend die Konstruktion der in dieser Arbeit implementierten Modelle beschrieben.

### 5.1 Abschätzung der Strukturparameter

Nach derzeitiger Vorstellung sind Sterne das letzte Glied einer Reihe von Fragmentationen der Gaswolken, aus denen sie entstehen. Der Weg von einem extrem gleichförmigen Universum kurz nach dem Urknall zum heutigen strukturierten Zustand ist nicht Gegenstand der hier vorgelegten Arbeit, hier soll nur die Entwicklung einzelner (isolierter und stark idealisierter) Protosterne beschrieben werden. Auf die thermonukleare Entwicklung von Pop III-Sternen, wie sie u.a. in Arbeiten von Straka [60] oder Siess et al. [54] untersucht wird, wird hier nicht eingegangen.

Für die erste Sternengeneration gibt es keine gesicherten Beobachtungsdaten. CIB-Beobachtungen (Kashlinsky et al. [28]) würden, selbst wenn sie wie angenommen Spuren der ersten leuchtenden Objekte zeigen, keine Aussagen über Einzelsterne erlauben. Die Bedingungen in heutigen Sternentstehungsgebieten unterscheiden sich deutlich von denen in der primordialen Gasmischung, so dass diese sich nicht dazu eignen, brauchbare Anfangswerte abzuleiten. Man ist also auf Modellrechnungen der Phase von und vor der Strukturbildung im frühen Universum angewiesen (z.B. Bromm, Coppi & Larson [9], Norman, Abel & Bryan [40]) um wenigstens eine gewisse Einschränkung der Sternstrukturparameter vornehmen zu können. Hierbei handelt es sich um Simulationsrechnungen, die im Rahmen eines bestimmten kosmologischen Modells (oft CDM) ein wohldefiniertes Problem darstellen, dessen Lösung Folgerungen auf die Bedingungen in den primordialen Gaswolken zulassen. Die Ergebnisse der in Abschnitt 1.1 kurz vorgestellten Arbeiten von Abel [2, 3] können in diesem Zusammenhang ebenfalls zur Abschätzung der Strukturparameter herangezogen werden.

Im primordialen Fall wird die Simulation der protostellaren Phase der Sternentstehung durch die vergleichsweise einfache Zusammensetzung des Gases (keine Metalle, insbes. kein Staub, keine dynamisch wichtigen Magnetfelder, keine äußeren Einflüsse durch Strahlung oder Sternwinde, da per Definition keine anderen Sterne oder Quasare vor-

## 5.1. ABSCHÄTZUNG DER STRUKTURPARAMETER

---

handen sind), vereinfacht. Unter diesen Umständen wird der Zustand des Gases am Beginn der Simulation im Wesentlichen durch die Mikrophysik von Wasserstoff festgelegt (Abschnitt 1.1):

Ohne Staub wird die Kühlung des Gases im Wesentlichen durch (molekularen) Wasserstoff gewährleistet, wodurch es auf nicht unter  $100, \dots, 200$  K abkühlen kann (Abschnitt 3.5). Bei dieser Temperatur findet der Übergang der Besetzungszahlen von NLTE nach LTE ab Teilchendichten von etwa  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  statt.

Dies erklärt auch, wieso die oben genannten Arbeiten trotz sehr unterschiedlicher Ansätze (3D AMR, SPH, Hydrodynamik, Berücksichtigung von Dunkler Materie) unabhängig voneinander zu dem Ergebnis kommen, dass es einen bevorzugten Zustand des primordialen Gases gibt, der bei einer Temperatur und Teilchendichte von

$$\begin{aligned} T &\approx 200 \text{ K} \\ n &\approx 10^4 \text{ cm}^{-3} \end{aligned}$$

liegt. Diese charakteristische Skala hat sich laut Aussagen dieser Autoren als robust im Sinne von relativ unabhängig von den Anfangswerten der entsprechenden Simulationsrechnung ergeben.

In diesem Fall beträgt die Jeansmasse  $M_J \approx 10^3 M_\odot$ . Durch weitere Fragmentationen (die Jeansmasse nimmt bei gleicher Temperatur mit steigender Dichte ab) könnte die Gesamtmasse der protostellaren Wolke (und damit letztendlich die des Sterns<sup>1</sup>) durchaus einen niedrigeren Wert haben. Ob es jedoch zur Fragmentation der protostellaren Wolke kommt, ist noch nicht abschließend geklärt. Es gibt Simulationsrechnungen, die keine Fragmentation feststellen konnten und entsprechend massive PopIII-Sterne vorhersagen(s.u.), während es bei anderen aufgrund nicht ausreichender Auflösung nicht möglich war, diese Frage zu beantworten (Abel [3]).

In der Literatur ist die IMF der ersten Sterne umstritten. Aus der hohen Anfangstemperatur, vor allem aber aus Beobachtungen wird gefolgert, dass es massereiche PopIII-Sterne gegeben haben muss, die zumindest einen Beitrag zur Reionisation des Universums bei  $z \approx 6$  geliefert haben. Ebenfalls aus Beobachtungen ist bekannt, dass es bereits bei einer Rotverschiebung von  $z \approx 4 - 5$  metallhaltige Objekte gegeben hat. Schwere Elemente können nur in Sternen synthetisiert worden sein, die dieses Material an das IGM abgegeben haben müssen. Hierfür kommen nur kurzlebige, d.h. massereiche Sterne in Frage. Dies schließt die Existenz masseärmerer PopIII-Sterne aber nicht aus. Bei ausreichend hoher Dichte kann ein bedeutender Anteil des Wasserstoffs durch Dreikörperprozesse in die molekulare Form übergehen, wodurch die Kühlung der Wolke erheblich effizienter wird. Mit steigender Dichte und fallender oder annähernd konstanter Temperatur nimmt die Jeansmasse der protostellaren Wolke ab, so dass laut Palla, Salpeter & Stahler [43] die Masse der kleinsten Fragmente  $0,1 M_\odot$  betragen haben könnte. Nakamura & Umemura [37] schlagen eine bimodale IMF vor, die bei etwa  $1 M_\odot$  und  $10 M_\odot$  Maxima hat. Vorhersagen liegen also im Bereich  $0,1 \lesssim M_{\text{tot}}/M_\odot \lesssim 200$  (Palla, Salpeter & Stahler [43], Abel et al. [2], Hutchings et al. [23]), wobei es eine Präferenz für hohe Massen gibt, da Simulationsrechnungen, die von einer hohen Jeansmasse ausgingen, keine weitere Fragmentation ergeben haben.

---

<sup>1</sup>Die Endmasse des Sterns hängt nicht nur von der Masse der protostellaren Wolke, sondern auch von der Akkretion ab.

Die Anfangshäufigkeiten der primordialen chemischen Spezies sind aus der Kombination von Beobachtungen und SBBN-Rechnungen recht gut bekannt (Abschnitt 3.2). Der Anteil molekularen Wasserstoffs wird im Bereich von  $10^{-6} \lesssim f_{\text{H}_2} \lesssim 5 \cdot 10^{-4}$  angegeben, der der freien Elektronen  $f_{e^-} \approx 10^{-10}$ . Die chemischen und radiativen Prozesse, die im primordialen Gas stattfinden, sind recht gut verstanden.

## 5.2 Konstruktion der Anfangsmodelle

Bei den in der hier vorgelegten Arbeit durchgeführten Simulationsrechnungen wird als Anfangskonfiguration stets eine ruhende, homogene Wolke gegebener chemischer Zusammensetzung  $n_i$ , die in einem Strahlungsfeld der Temperatur  $T_{\text{rad}}$  eingebettet ist, angenommen. Anfangs werden  $T_{\text{init}} = T_{\text{rad}} = T_{\text{gas}}$  gesetzt.

Wenn die chemische Zusammensetzung und damit die Teilchen- bzw. Massendichte sowie die Temperatur des Gases gegeben sind, können die restlichen Strukturvariablen formal hieraus bestimmt werden, wenn man außerdem annimmt, dass die Wolke homogen, radial symmetrisch und gravitativ instabil sein soll.

### 5.2.1 Anfangswerte der Strukturvariablen

#### Gesamtmasse und Radius

Die Jeansmasse einer homogenen Kugel kann folgendermaßen abgeschätzt werden: Nach dem Virialsatz muss für das Verhältnis von kinetischer zu potentieller Energie

$$\frac{2E_{\text{kin}}}{-E_{\text{pot}}} = \frac{3k_{\text{B}}T/\mu m_{\text{H}}}{\left(\frac{3}{4\pi\rho}\right)^{-1/3} \text{G} \frac{3}{5}M^{5/3}} = 1, \quad (5.1)$$

gelten. Die Mindestmasse einer homogenen, gravitativ instabilen Kugel muss also

$$M_{\text{Jeans}} = \left(\frac{4\pi}{3 \cdot 5^3}\right)^{-1/2} \left(\frac{\mu \text{G} m_{\text{H}}}{k_{\text{B}}}\right)^{-3/2} \cdot \rho^{-1/2} T^{3/2} \quad (5.2)$$

betragen. Bei gegebener chemischen Zusammensetzung hängt die Jeansmasse nur von der Temperatur und der Dichte ab. Formal genügt es also für die Durchführung von Simulationsrechnungen zur Entstehung von Pop III-Sternen die Parameter Anfangstemperatur, sowie die chemische Anfangszusammensetzung (aus der die Massendichte berechnet werden kann) festzulegen. Wenn die Anfangsmasse so gewählt wird, dass sie leicht über der Jeansmasse liegt, ist sichergestellt, dass die Anfangskonfiguration gravitativ instabil ist.

Der Gesamtradius dieser Kugel beträgt

$$R_{\text{tot}} = \left(\frac{3 M_{\text{tot}}}{4\pi \rho_{\text{init}}}\right)^{1/3}. \quad (5.3)$$

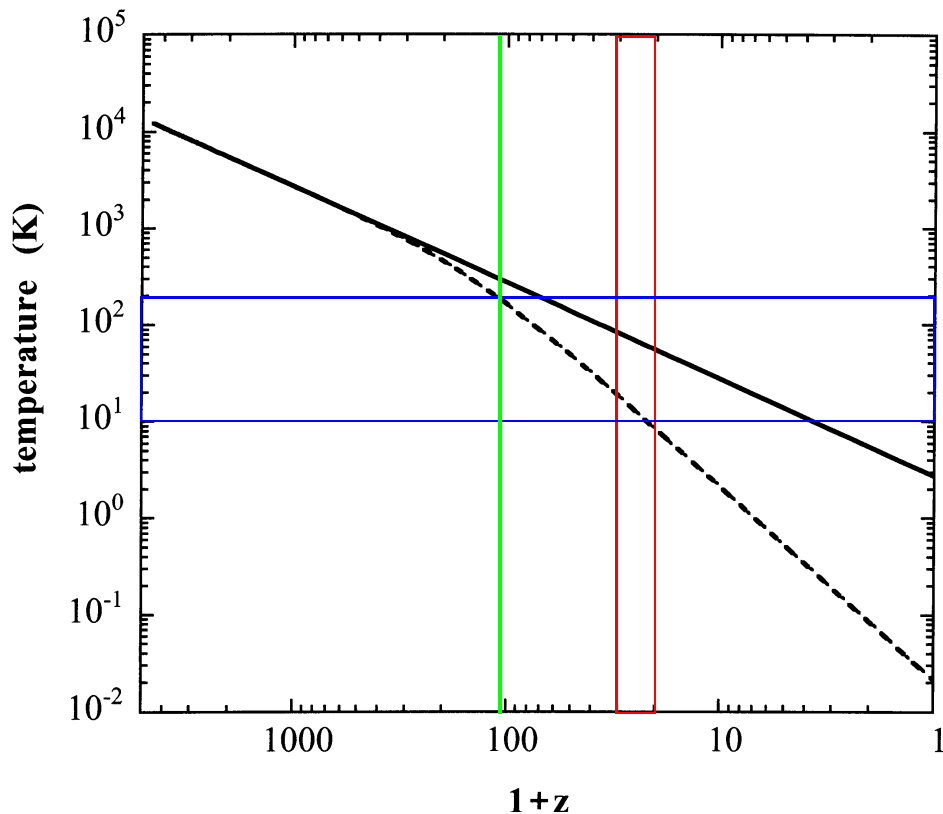


Abbildung 5.1: Temperatur in Abhängigkeit der Rotverschiebung (aus Flower et al. [19]). Die durchgezogene Kurve stellt die Temperatur der Schwarzkörperstrahlung dar, die gestrichelte Linie steht für die Temperaturen von neutralen Teilchen, Ionen und Elektronen. Zur Verdeutlichung sind folgende Bereiche von mir markiert worden. Horizontal: Temperaturbereich zwischen 10 und 200 K, vertikal die Rotverschiebung  $z \approx 20, \dots, 30$  bzw.  $z = 100$ .

### Temperatur

Die ersten Objekte haben sich bei einer Rotverschiebung zwischen  $z \approx 20, \dots, 30$  gebildet. Dies würde nach Abbildung 5.1 einer Teilchentemperatur von etwa  $T \approx 10, \dots, 20$  K entsprechen, die Hintergrundstrahlung wäre zu diesem Zeitpunkt etwa eine knappe Größenordnung wärmer. Diese Temperatur kann von einer aus reinem Wasserstoff bestehenden Wolke auch bei hoher Teilchendichte durch  $H_2$ -Kühlung allein nicht erreicht werden, wie aus Abbildung 3.6 auf Seite 57 zu entnehmen ist.

### Dichte

Vergleicht man die vorhergesagten Werte der IMF mit den Werten der Jeansmasse einer isothermen, aus reinem Wasserstoff bestehenden Gaskugel, deren Temperatur zwischen zehn und 400 K liegt, so ergibt sich ein Bereich für die Anfangsdichte, der in etwa zwischen  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  und  $10^9 \text{ cm}^{-3}$  bzw.  $10^{-19} \text{ g cm}^{-3}$  und  $10^{-15} \text{ g cm}^{-3}$  liegt. Um in diesem Bild eine Konfiguration mit einer Gesamtmasse von  $0,1 M_\odot$  zu erhalten, müsste



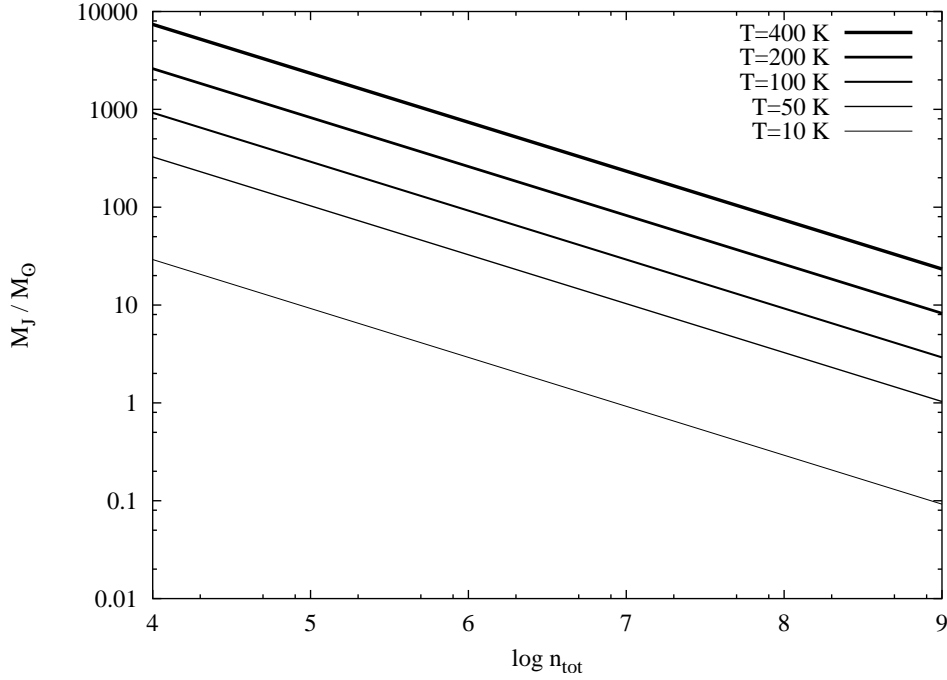


Abbildung 5.2: Jeansmasse  $M_J$  in Sonnenmassen einer aus atomarem Wasserstoff bestehenden Kugel bei konstanter Temperatur (von oben nach unten 400, 200, 100, 50, 10 K) als Funktion der Teilchendichte (in  $\text{cm}^{-3}$ ).

die Wolke bei einer Dichte von  $10^9 \text{ cm}^{-3}$  auf ca. 10 K abkühlen.

Der Bereich der vorhergesagten IMF würde durch eine Reihe von Simulationsrechnungen, die den in Tabelle 5.1 angegebenen Temperatur- und Dichtebereich überspannt, mehr als abgedeckt. Wie in Abschnitt 6.2.2 zu sehen sein wird, ist es nicht notwendig für jedes der oben tabellierten  $n - T$ -Wertepaare eine Simulationsrechnung durchzuführen, um den vorhergesagten Wertebereich abzudecken. Der Grund dafür ist, dass ein Modell mit einer Anfangsteilchendichte von beispielsweise  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  in der isothermen Kontraktionsphase in Zentrum über  $10^9 \text{ cm}^{-3}$  erreicht, bevor die Wolke optisch dick wird.

Tabelle 5.1: Jeansmasse einer homogenen Wolke in Sonnenmassen für den in Abbildung 5.2 gezeichneten Dichte- und Temperaturbereich.

T [K]	$n_{\text{tot}} [\text{cm}^{-3}]$					
	$10^4$	$10^5$	$10^6$	$10^7$	$10^8$	$10^9$
400	7382.29	2334.48	738.23	233.45	73.82	23.34
200	2610.03	825.37	261.00	82.54	26.10	8.25
100	922.79	291.81	92.28	29.18	9.23	2.92
50	326.25	103.17	32.63	10.32	3.26	1.03
10	29.18	9.23	2.92	0.92	0.29	0.09

### Chemische Anfangszusammensetzung

Die primordiale Gasmischung bestand aus Wasserstoff, Deuterium, Helium und Lithium. Im chemischen Netzwerk (Anhang B) können die Spezies  $\text{H}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{H}_2^{\text{ortho}}$ ,  $\text{H}_2^{\text{para}}$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$ ;  $\text{D}$ ,  $\text{D}^+$ ,  $\text{D}^-$ ,  $\text{HD}^+$ ,  $\text{H}_2\text{D}^+$ ;  $\text{He}$ ,  $\text{He}^+$ ,  $\text{He}^{++}$ ,  $\text{He}_2^+$ ,  $\text{HeH}^+$ ;  $\text{Li}$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ ,  $\text{Li}^{+++}$ ,  $\text{Li}^-$ ,  $\text{LiH}$ ,  $\text{LiH}^+$ ,  $\text{LiH}^-$ ;  $e^-$  und Photonen vorkommen.

Die Simulationsrechnung kann mit beliebigen Anfangswerten  $n_i$  gestartet werden; dabei wurden die Erfahrungen anderer astrochemischen Gebiete (z.B. protoplanetare Scheiben) bestätigt, bei denen ein nicht unbedeutender Teil der Rechenzeit gebraucht wird, um zunächst einen Zustand nahe des stationären Gleichgewichts bezüglich der Chemie zu erreichen, bevor der eigentliche protostellare Kollaps beginnt, d.h. eine Phase, die physikalisch unbedeutend ist. Aus diesem Grund wurden die Anfangswerte der  $n_i$  stets so gewählt, dass sie in der Nähe des Gleichgewichts lagen. Eine andere Wahl der chemischen Anfangszusammensetzung führt zu Endergebnissen, die sich bis auf die physikalisch unbedeutende Anfangsphase nicht voneinander unterscheiden, sondern nur die Wahl ungeeigneter Anfangswerte widerspiegelt, so wie von Ripamonti et al. [50] beschrieben.

### Innere Energie

Die innere Energie wird durch Angabe von Temperatur und chemischer Zusammensetzung durch die Summe der thermischen und chemischen Energie (Gleichungen (2.18) bis (2.19) in Abschnitt 2.3.2 Seite 35) festgelegt.

### Strahlungstransport

Die Anfangswerte für Strahlungsenergie und Strahlungsfluss (0. bzw. 1. Moment der Intensität  $I$  Abschnitt 2.2.1 Seite 26) wurden auf den Wert eines schwarzen Strahlers bzw. Null gesetzt

$$J = \frac{\sigma}{\pi} T^4$$

$$H = 0.$$

Zwischen zwei Integrationsschritten wird die Strahlungstransportgleichung für den grauen Fall gelöst (Anhang A) und aus den erhaltenen Momenten die Eddingtonfaktoren  $f_{\text{Edd}}$  (Gleichung (A.34)) und  $g_{\text{Edd}}$  (Gleichung (5.4)) bestimmt, die im nächsten Integrationsschritt benutzt werden.

### Materialfunktionen

Die Opazität  $\kappa$  ist eine Funktion der chemischen Zusammensetzung, Dichte und Temperatur (Abschnitt 2.3.1). Der aktuelle Wert wird zwischen zwei Integrationsschritten mit den jeweils neuesten Werten von  $n_i$  bzw.  $\rho$  und  $T$  berechnet und im folgenden Integrationsschritt benutzt. Es wurden für drei Fälle Simulationsrechnungen durchgeführt:

- $\kappa_{e^-}$ : Nur der Elektronenbeitrag zur Opazität wurde benutzt. Die Opazität ist also konstant. Es gilt  $\kappa_P = \kappa_R = \kappa_{e^-} = 0.348 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$  ist. Dieser stark vereinfachte Fall ist nicht realistisch, dient aber zu Vergleichs- und Testzwecken.
- $\kappa_{\text{PopI}}$ : Die Opazität wurde mittels einer analytischen Fitformel für das Rosse-landmittel (Gleichung (2.14)) genähert und  $\kappa_P = \kappa_R$  gesetzt. Diese Rechnungen dienen dem Vergleich der Entwicklungen von primordialen und PopI Protosternen.
- $\kappa_{\text{PopI}}$ :  $\kappa_R$  wird für variable Werte von  $\rho$  und  $T$  aus tabellierten Werten von Mayer [35] interpoliert, wobei  $\kappa_R$  unter der Annahme, dass sich das primordiale Gas ( $Z = 0$ ) für den gegebenen  $\rho$ - $T$ -Wert im chemischen Gleichgewicht befindet, berechnet wird. Falls der Wert von Temperatur und/oder Dichte nicht im Gültigkeitsbereich der Interpolationstabellen liegt (s. Seite 31), wird der Randwert benutzt<sup>2</sup>. Das Planckmittel der Opazität kann analog zu  $\kappa_R$  oder zusätzlich in Abhängigkeit der aktuellen chemischen Zusammensetzung bestimmt werden.

Der Druck wird aus der Zustandsgleichung eines ideales Gases (Gleichung (2.15) in Abschnitt 2.3.2) berechnet.

### 5.2.2 Randbedingungen

Die Randbedingungen sind nicht nur formale Bedingungen um eine Rechnung überhaupt durchführen zu können, sie sind stets auch ein Teil des physikalischen Problems, die teilweise dessen Eigenschaften festlegen.

#### Innenrand

Das Zentrum des Objekts soll durch einen geometrischen Punkt gegeben sein, der im Rechengitter durch den Index  $m = 0$  definiert wird. Es ist physikalisch sinnvoll zu fordern, dass die Dichte an dieser Stelle einen nichtverschwindenden, endlichen Wert haben soll, daher geht mit  $m \rightarrow 0$  auch  $r \rightarrow 0$ :

$$\begin{aligned} r_0 &= 0 \\ u_0 &= 0 \\ m_0 &= 0. \end{aligned}$$

Es gibt im Zentrum keine Strahlungsquelle.

#### Außenrand

Die Lage des Außenrands wird so festgelegt, dass am äußersten Punkt  $r_N$  die Gesamtmasse  $M_{\text{tot}}$  eingeschlossen wird. Der Außenrand wird festgehalten, wegen der Forderung

---

<sup>2</sup>Das Gas ist bei hoher Temperatur und Dichte ionisiert, die Opazität ändert sich dann nicht mehr; bei tiefer Temperatur und Dichte ist die Opazität ohnehin sehr klein und der entsprechende Bereich der Wolke optisch dünn. Die Kombination hohe Teilchendichte und tiefe Temperatur oder umgekehrt kommt nicht vor.

nach Massenerhaltung darf kein Material über den Außenrand ein- oder ausfließen:

$$\begin{aligned} r_N &= R_{\text{tot}} = \text{const} \\ u_N &= 0 = \text{const} \\ m_N &= M_{\text{tot}} = \text{const}. \end{aligned}$$

Der Außenrand begrenzt das Integrationsgebiet; es handelt sich nicht um die Oberfläche des Protosterns.

In der äußersten Schale wird keine Leuchtkraft erzeugt. Die Abstrahlung über den Außenrand entspricht dem bis zur vorletzten Schale ( $N-1$ ) erzeugten, um die geometrische Verdünnung verringerten Strahlungsstrom.

Die äußere Randbedingung für die Strahlungsmomente lautet

$$\begin{aligned} 0 &= J_N - \frac{\frac{1}{2}B(T_{\text{rad}}) - (H_N + \frac{1}{4}B(T_{\text{rad}}))}{g_{\text{Edd}}} \\ 0 &= - (r_N^2 H_N - r_{N-1}^2 H_{N-1}) - \rho_N \kappa_P (J_N - S_N), \end{aligned}$$

wobei der Eddingtonfaktor

$$g_{\text{Edd}} = \frac{\tilde{H}_N + \frac{1}{4}B(T_{\text{rad}})}{\tilde{J}_N - \frac{1}{2}B(T_{\text{rad}})} \quad (5.4)$$

mit den Momenten  $\tilde{J}$  und  $\tilde{H}$ , die aus der Lösung der Strahlungstransportgleichung resultieren, benutzt werden und

$$B(T_{\text{rad}}) = \frac{\sigma}{\pi} T_{\text{rad}}^4 \quad (5.5)$$

die Kirchhoff-Planck-Funktion des Strahlungsfelds, in das die Wolke eingebettet ist, ist.

### Adaptives Gitter

Durch das adaptive Gitter, das hier nach Dorfi & Drury [14] (Abschnitt 4.3), implementiert wurde, wird die Lage der radialen Stützpunkte durch eine Monitorfunktion  $\mathcal{M}$  so gesteuert, dass während der Simulationsrechnung entstehende Strukturen auflöst werden können. Durch die Einführung des adaptiven Gitters müssen die Randbedingungen leicht modifiziert werden. Der **Außenrand** wird zeitlich und räumlich festgehalten; sowohl Gas- als auch Gittergeschwindigkeit müssen an dieser Stelle Null sein:

$$\partial_t r_N = \partial_t R_{\text{tot}} = 0 \quad (5.6)$$

$$u_N = u_N^{\text{rel}} = 0. \quad (5.7)$$

Es kann also kein Material über den Außenrand fließen, das numerische Verfahren stellt nach wie vor die Massenerhaltung bis auf Rundungsfehler sicher.

Am **Innenrand** wird nicht mehr die Lage, sondern die Masse innerhalb des innersten Stützpunktes festgehalten, d.h.

$$\partial_t m_1 = \partial_t \left( \frac{1}{3} \rho_1 r_1^3 \right) = 0. \quad (5.8)$$

Dadurch ist der innerste radiale Stützpunkt nicht mehr räumlich fest. Durch eine geeignete Wahl von  $m_1$  wird so sichergestellt, dass die Auflösung im zentralen Bereich stets ausreicht um den entstehenden Protostern darzustellen. Die Relativgeschwindigkeit am ersten Gitterpunkt muss verschwinden, denn aufgrund der Forderung nach Massenerhaltung darf auch über den Innenrand kein Material fließen; dies bedeutet aber nicht, dass die Gasgeschwindigkeit an dieser Stelle Null sein muss, wie es bei Modellen ohne bewegten Innenrand der Fall sein müsste:

$$u_1^{\text{rel}} = u_1 - u_1^g = 0.$$

### 5.2.3 Allgemeines zu den Anfangsmodellen

Die Anfangsmodelle werden folgendermaßen konstruiert:

- Temperatur  $T_{\text{init}}$  und Teilchendichten  $n_{i,\text{init}}$  der im Modell zu berücksichtigenden Spezies  $i$  werden gewählt, damit ist die Jeansmasse nach Gleichung (5.2) festgelegt. Um eine (anfangs) gravitativ instabile Konfiguration zu garantieren, wird die Gesamtmasse der Kugel so gewählt, dass ihr Wert den der entsprechenden Jeansmasse übersteigt.
- Die homogene Kugel wird so in  $N$  Schalen aufgeteilt, dass die radialen Stützpunkte zwischen dem (vorgegebenem) Innenradius  $r_1$  und dem Außenradius  $r_N = R_{\text{tot}}$  (Gleichung (5.3)) logarithmisch äquidistant verteilt sind:

$$\begin{aligned} r_1 &= 10^{-3} R_{\text{tot}} \\ r_l &= r_{l-1} \cdot 10^{\log(R_{\text{tot}}/r_1)/(N-1)} \quad l = 2, \dots, N-1. \end{aligned}$$

$r_1$  ist so gewählt, dass die bis zu diesem Radius eingeschlossene Masse sicher innerhalb des sich bildenden Sterns liegt. Bei Modellen ohne chemische Entwicklung wurde  $r_1 = 10^{-3} R_{\text{tot}}$  gesetzt, bei Modellen einschließlich chemischer Entwicklung war  $r_1 = 10^{-4} R_{\text{tot}}$ .

- Am Anfang der Rechnung befindet sich die Kugel in Ruhe, die Temperatur ist konstant, ebenso die durch die Teilchendichten der Spezies  $i$  vorgegebene Anfangsmassendichte  $\rho_{\text{init}}$  ( $m_i$  ist das Atomgewicht der Spezies  $i$ ), d.h. für alle Gitterpunkte ( $l = 1, \dots, N$ ) gilt:

$$\begin{aligned} u_l &= 0 \\ T_l &= T_{\text{init}} \\ \rho_{l,\text{init}} &= \sum_i n_{i,l,\text{init}} m_i. \end{aligned}$$

Die Masse (geteilt durch  $4\pi$ )  $m_l$  innerhalb des Radius  $r_l$  kann leicht berechnet werden:

$$m_l = \frac{1}{3} r_l^3 \rho_{l,\text{init}} \quad l = 1, \dots, N.$$

Aus diesen Größen bzw. deren Zahlenwerten werden die anderen Strukturparameter ( $E_{\text{int}}$ ,  $J$ ,  $H$ ) und Materialfunktionen (Druck, Opazität, Molekulargewicht usw.), wie in Abschnitt 5.2.1 beschrieben, festgelegt.

## 5.2. KONSTRUKTION DER ANFANGSMODELLE

---

- Desweiteren werden für die praktische Ausführung der Rechnung benötigt: Anzahl der Gitterpunkte, Lage des innersten Punktes  $r_1$ , Eigenschaften des adaptiven Gitters Werte für die Parameter  $q_1$  und  $q_2$  der künstlichen Viskosität, womit festgelegt wird, wie stark der Stoß ausgeschmiert wird.

# Kapitel 6

## Modellrechnungen

### 6.1 Vorbemerkungen

Die Modellrechnungen beginnen, wie im vorangegangenen Kapitel beschrieben, mit einer ruhenden, homogenen Kugel konstanter Temperatur und chemischer Zusammensetzung<sup>1</sup>. Die bedeutet u.a., dass es am Beginn der Simulationsrechnung noch keinen hydrostatischen Bereich gibt, der mit einem Protostern identifiziert werden könnte. Daher sollen zunächst die Begriffe *Alter*, *Effektivtemperatur*, *Radius und Masse* des sich zu bildenden Protosterns festgelegt werden, wobei den von Wuchterl und Tscharnuter [70] vorgeschlagenen Definitionen gefolgt wird:

Als Geburtsstunde des Protosterns wird der Zeitpunkt, in dem das Gas in der Wolke zum ersten Mal thermisch abgeschlossen ist, d.h. die Strahlung nicht mehr in der Lage ist, direkt zu entweichen, gewählt. Dieser Zeitpunkt ist erreicht, sobald das Rosselandmittel der optischen Tiefe den Wert  $2/3$  erstmals erreicht:

$$\tau_{\text{R}} = \int_0^R \kappa_{\text{R}} \rho \, dr = \frac{2}{3} \quad (R \text{ ist der Radius der Wolke}). \quad (6.1)$$

Diese Definition hat zwei wichtige Eigenschaften: einerseits ändern sich die Strukturgrößen der Wolke und damit die beobachtbaren Größen um diesen Zeitpunkt herum sehr schnell, d.h. es handelt sich um einen wohldefinierten Zeitabschnitt. Außerdem ist dies der früheste Zeitpunkt, an dem eine Effektivtemperatur definiert werden kann. Dieser Moment kann nahezu mit dem Ende der isothermen Kontraktionsphase zusammenfallen.

Der Photosphärenradius  $R_{\text{ph}} = R_{\tau}$  wird ebenfalls über die optische Tiefe definiert, nämlich als die Stelle  $r'$ , an der

$$\tau_{\text{R}} = \int_{r'}^R \kappa_{\text{R}} \rho \, dr = \frac{2}{3} \quad (6.2)$$

gilt. Die Masse  $M_{\tau}$  innerhalb von  $R_{\tau}$  wird als die Masse des Protosterns bezeichnet.

---

<sup>1</sup>Für die Ergebnisse der Simulationsrechnungen ist es unwichtig, dass diese Anfangskonfiguration unphysikalisch ist, weil die Erinnerung des Modells an die Anfangsbedingungen in Laufe der isothermen Kontraktionsphase verloren geht.

## 6.1. VORBEMERKUNGEN

---

Die weitere Entwicklung sowie die Eigenschaften des (Proto-) Sterns werden durch diese Masse bestimmt, nicht durch die der Gesamtwolke.

Sobald ein Radius, in diesem Fall  $R_\tau$ , definiert ist, können die Leuchtkraft  $L$  und die Effektivtemperatur  $T_{\text{eff}}$  definiert werden:

$$L = 4\pi R_\tau^2 \sigma T_{\text{eff}}^4 = 4\pi R_\tau^2 4\pi H \quad (6.3)$$

$$T_{\text{eff}} = \left[ \frac{L}{4\pi\sigma R_\tau^2} \right]^{\frac{1}{4}} = \left[ \frac{4\pi H}{4\pi\sigma R_\tau^2} \right]^{\frac{1}{4}}, \quad (6.4)$$

wobei der Strahlungsstrom  $F = 4\pi H$  aus dem ersten Moment der Strahlungsintensität  $H$ , d.h. aus der Lösung der Momentengleichungen (Gleichung (2.11)), an der Stelle  $R_{\text{ph}} = R_\tau$  berechnet werden kann.

Als Masse  $M_{\text{Kern}}$  bzw. Radius  $R_{\text{Kern}}$  des hydrostatischen Kerns wird nach Ripamonti et al. [50] die Masse innerhalb einer Kugel mit dem Radius definiert, an dem die Einfallgeschwindigkeit unter einem Zehntel der Freifallgeschwindigkeit an dieser Stelle liegt:

$$u < 0,1v_{\text{ff}} \text{ mit } v_{\text{ff}} = \sqrt{\frac{2Gm_r}{r}}. \quad (6.5)$$

Darüber hinaus ist erst von einem hydrostatischen Kern die Rede, wenn die Maximalgeschwindigkeit betragsmäßig größer als ein Zehntel der lokalen Freifallgeschwindigkeit ist.

Der Vollständigkeit halber wird der Begriff der Eddingtonleuchtkraft  $L_{\text{Edd}}$  eingeführt: Diese Größe beschreibt den maximalen Energiefluss, der durch eine sich im hydrostatischen Gleichgewicht befindende Gasschicht transportiert werden kann. Der durch eine höhere als die Eddingtonleuchtkraft erzeugte Strahlungsdruck würde dazu führen, dass die darüber liegende Schicht abgestoßen würde. Der Wert lässt sich unter Annahme sphärischer Symmetrie folgendermaßen abschätzen: bei einer Gasschicht, die sich im hydrostatischen Gleichgewicht befindet, gleichen sich der nach außen gerichtete Strahlungsdruck

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{\kappa\rho}{c} F_{\text{rad}} = -\frac{\sigma_{\text{T}}\rho}{m_{\text{P}} c} \frac{L}{4\pi R^2}$$

und der nach innen gerichtete Gravitationsdruck

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{GM\rho}{R^2}$$

aus. Es wird hier angenommen, dass Thomsonstreuung die Opazität in der Sternatmosphäre dominiert, was aber nur für heiße Sterne zutrifft.

Durch Gleichsetzen obiger Gleichungen erhält man

$$L_{\text{Edd}} = \frac{4\pi GM m_{\text{P}} c}{\sigma_{\text{T}}} \approx 1,3 \cdot 10^{38} \left( \frac{M}{M_\odot} \right) \text{ erg s}^{-1} = 3,3 \cdot 10^4 \left( \frac{M}{M_\odot} \right) L_\odot, \quad (6.6)$$

wobei die üblichen Bezeichnungen für Lichtgeschwindigkeit, Protonmasse und Thomsonquerschnitt benutzt wurden.



## 6.2 Modellrechnungen mit Strahlungshydrodynamik und chemisch konstanter Zusammensetzung

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von Modellrechnungen vorgestellt, bei denen die chemische Zusammensetzung durch Nullsetzen des Ratenterms im chemischen Netzwerk (Gleichung (3.6) bzw. Gleichung (4.52)) konstant gehalten wurde. Hierdurch sollte einerseits die Funktionsfähigkeit des strahlungshydrodynamischen Teils des Modells belegt, andererseits die Bedeutung der chemischen Prozesse während der Entwicklung einer protostellaren Wolke demonstriert werden. Diese Modellrechnungen sind also mehr als nur Machbarkeitsstudien. In diesem vereinfachten Fall wird die Entwicklung der Wolke ausschließlich durch die Kontraktion durch Gravitation und durch Abstrahlung gesteuert. Auf diese Weise kann der Einfluss der chemischen Prozesse bei der Bildung des Protosterns beobachtet werden, indem die Modelle aus diesem Kapitel mit denen im nächsten Kapitel, bei denen die chemische Entwicklung berücksichtigt wird, verglichen werden.

Durch verschiedene Ansätze zur Modellierung der Opazität werden unterschiedlich starke Kopplungen zwischen Gas und Strahlungsfeld simuliert, was Aussagen über den Einfluss der Wechselwirkung zwischen Materie und Strahlungsfeld auf die Entwicklung der Gaswolke ermöglicht. Auch hier ist es von Vorteil, den chemischen Teil der Simulation einstweilig auszuklammern, um so die Auswirkungen der einzelnen Effekte isoliert untersuchen zu können.

Die Rechnung wird beendet, sobald die Temperatur des Kerns  $10^5$  K erreicht. Bei dieser Temperatur wären alle chemischen Elemente längst ionisiert, so dass im Sinne der chemischen Entwicklung keine weiteren Aussagen zu machen wären.

Die Entwicklung ist bei allen Modellen mit gleichem Absorptionskoeffizienten unabhängig von den weiteren Anfangsbedingungen ( $T$ ;  $n_i$ ) qualitativ ähnlich, daher werden zunächst exemplarisch die Ergebnisse der Entwicklung der Strukturgrößen eines Modells ausführlich gezeigt. Der Einfluss der Anfangsbedingungen auf die Entwicklung der Modelle ist Gegenstand des Abschnitts 6.2.2.

Die Entwicklung läuft unabhängig von den Anfangswerten stets nach dem gleichen Muster ab:

### Kollapsphasen:

1. Am Beginn der Simulation gibt es noch keinen Druckgradienten. Die anfangs ruhende Materie beginnt in Richtung Zentrum zu fallen. Es handelt sich um beinahe freien Fall ( $\rho \sim r^{-2}$ ), die Dichte steigt innen stärker und schneller an als außen.
2. Bildung eines optisch dicken Kerns. In der Zentralregion nimmt die optische Tiefe einen Wert größer als 2/3 an, deswegen kann die Kompressionswärme nicht mehr frei abgestrahlt werden. Ab diesem Punkt findet die Kontraktion praktisch adiabatisch statt.
3. Bildung eines hydrostatischen Kerns. Das sich weiter außen befindende Material fällt mit Überschallgeschwindigkeit auf den Kern herab und wird dort schlagartig

## 6.2. MODELLRECHNUNGEN OHNE CHEMISCHE ENTWICKLUNG

Tabelle 6.1: Ergebnisse der Modellrechnungen mit unterschiedlichen Absorptionskoeffizienten. Die Anfangswert von  $T_{\text{init}} = 200$  K,  $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$  ergeben eine Gesamtmasse von  $2905 M_{\odot}$ . Oben sind die Werte der Modellrechnungen ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung eingetragen, unten für die Modelle einschließlich der chemischen Entwicklung (siehe Abschnitt 6.3). Die Zahlen beziehen sich auf den Zustand des Objekts bei Erreichen der Abbruchbedingung ( $T_c = 10^5$  K),  $M_{\tau}$  und  $R_{\tau}$  sind die Masse bzw. der Radius des Objekts an der Stelle, an der die optische Tiefe  $\tau_R = 2/3$  beträgt; bei PopI-Opazität wird dieser Zustand für die äußere Staubhülle sowie für den eigentlichen Protostern angegeben.  $M_{\text{Kern}}$  und  $R_{\text{Kern}}$  sind die entsprechenden Werte für den hydrostatischen Kern nach Gleichung 6.5. Das Alter des Objekts bezieht sich auf die Zeit, die seit dem erstmaligen Erreichen von  $\tau_R = 2/3$  verstrichen ist (Abschnitt 6.1).

$\kappa$	$M_{\tau} [M_{\odot}]$	$R_{\tau} [\text{cm}]$	$M_{\text{Kern}} [M_{\odot}]$	$R_{\text{Kern}} [\text{cm}]$	Alter [a]
Modelle ohne chemische Entwicklung					
const	73,73	$7,75 \cdot 10^{16}$	3,63	$4,12 \cdot 10^{13}$	27697
PopI	72,35	$7,66 \cdot 10^{16}$	1,91	$1,31 \cdot 10^{13}$	17511
	1,91	$1,29 \cdot 10^{13}$			
PopIII	2,59	$1,05 \cdot 10^{13}$	2,60	$1,18 \cdot 10^{13}$	107
Modelle einschließlich chemischer Entwicklung					
PopI	66,03	$7,4 \cdot 10^{16}$	0,0008	$3,9 \cdot 10^8$	25696
	0,19	$2,8 \cdot 10^{12}$			
PopIII	0,06	$7,6 \cdot 10^{11}$	0,0002	$1,8 \cdot 10^8$	2

abgebremst. Ein Stoß bildet sich. Das Material regnet weiterhin auf den hydrostatischen Kern (definiert als der Teil des Protosterns, der sich innerhalb des Stoßes befindet und dessen Geschwindigkeit unter einem Zehntel der Freifallgeschwindigkeit liegt, siehe Gleichung (6.5)) ab; seine Masse wächst an.

Ab diesem Zeitpunkt fällt das Material immer schneller ins Zentrum, der Kern kontrahiert weiter, seine Temperatur und Dichte nehmen zu, bis die Rechnung beendet wird.

### 6.2.1 Modelle mit unterschiedlichem Absorptionskoeffizienten

Hier werden die Ergebnisse von Simulationsrechnungen gezeigt, bei denen eine Anfangskonfiguration gewählt wurde, deren Anfangstemperatur von 200 K und deren Anfangsteildichte  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  betrug. Für die Opazität wurden

1. ein konstanter Wert ( $\kappa_{e-}$ ),
2. die analytische Näherung für PopI-Gasmischung ( $\kappa_{\text{PopI}}$ ), siehe Gleichung (2.14),
3. und die tabellierten Werte nach Mayer [35] ( $\kappa_{\text{PopIII}}$ ) für die PopIII-Gasmischung verwendet.

Die Ergebnisse der Modellrechnungen sind in den Abbildungen 6.1 bis 6.9 in drei Gruppen für die drei Modelle der Opazität dargestellt.

Die Abbildungen 6.1, 6.4 und 6.7 zeigen die zeitliche Entwicklung der Größen Dichte  $\rho$ , radiale Geschwindigkeit  $u$ , Temperatur  $T$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ , jeweils für die Modelle mit konstanter, PopI- und PopIII-Opazität, in Abhängigkeit der Radialkoordinate. Es ist zu sehen, wie die anfangs homogene, optisch dünne Wolke zu kontrahieren beginnt. Die Dichte steigt an (im Zentrum stärker als außen), Temperatur und Radialgeschwindigkeit nehmen zu. Aufgrund der inneren Randbedingung (Masse innerhalb des innersten radialen Gitterpunktes konstant, Gleichung (5.8)) wandert der innere Radius mit steigender Dichte einwärts. Insgesamt ist bei allen Modellen zu beobachten, dass die Wolke kollabiert; die Abweichungen vom freien Fall ( $r \sim \rho^{-2}$ ) sind gering. Es sind drei Entwicklungsstadien zu erkennen: die Anfangsphase, in der das Gas optisch dünn ist ( $\tau_R < 2/3$ ), die Entstehung des optisch dicken Protosterns ( $\tau_R \geq 2/3$ ) und danach des hydrostatischen Kerns ( $u < 0,1v_{\text{ff}}$ ). Diese drei Stadien sind in den Abbildungen farbig markiert (rot für  $\tau_R < 2/3$ , grün für  $\tau_R \geq 2/3$  und blau für den hydrostatischen Bereich).

### Konstante Opazität

Bei den Modellen mit konstanter Opazität ist der Übergang zwischen diesen Phasen deutlich sichtbar. Nach einer isothermen Kontraktionsphase bildet sich der optisch dicke Protostern, dessen Ausdehnung aufgrund der unter diesen Bedingungen unrealistisch hohen Opazität sehr groß ausfällt. Dies erklärt die niedrige Effektivtemperatur im Hertzsprung-Russell-Diagramm (Abbildungen 6.2 und 6.3<sup>2</sup>). Anschließend bildet sich nach weiterem Kollaps der hydrostatische Kern, dessen Masse zunimmt, während sein Radius schrumpft.

### PopI-Opazität

Die Entwicklung der Modelle mit PopI-Opazität ist etwas komplexer. Insgesamt hat man es am Ende der Simulationsrechnung mit einem Protostern, der in einer kühlen Staubhülle eingebettet ist, zu tun. Ein Beobachter würde die kühle Staubhülle, nicht aber den Protostern sehen. Die Ergebnisse der Simulation können folgendermaßen interpretiert werden: Bei niedrigen Temperaturen ist die Opazität durch die Anwesenheit von Staub verhältnismäßig hoch, d.h. die Stelle, an der erstmals  $\tau_R = 2/3$  erreicht wird, liegt sehr weit außen bei Temperaturen  $T < 1000$  K. Während der Kontraktion heizt sich dieses Gebiet weiter auf. Bei Erreichen einer Temperatur von ca. 1300 K beginnt der Staub zu verdampfen, wodurch die Opazität sehr stark abnimmt (s. Abbildung 2.4). Dies hat die Entstehung eines transparenten Bereichs, der die Staubhülle und den eigentlichen Protostern trennt, zur Folge, denn die Opazität steigt erst wieder an, wenn die Temperatur ca. 4500 K erreicht. Diese Zone ist an dem plateauartigen Verlauf der Temperaturkurve nahe 1500 K in Abbildung 6.4 zu erkennen. Deswegen ist es in diesem Fall zweckmäßig, bei der Definition von  $R_\tau$  bzw.  $M_\tau$  (Gleichung (6.2)) zwischen

---

<sup>2</sup>Die Größen in dieser Abbildung haben wegen der unrealistischen Annahme einer konstanten Opazität eine formale, aber keine physikalische Bedeutung.

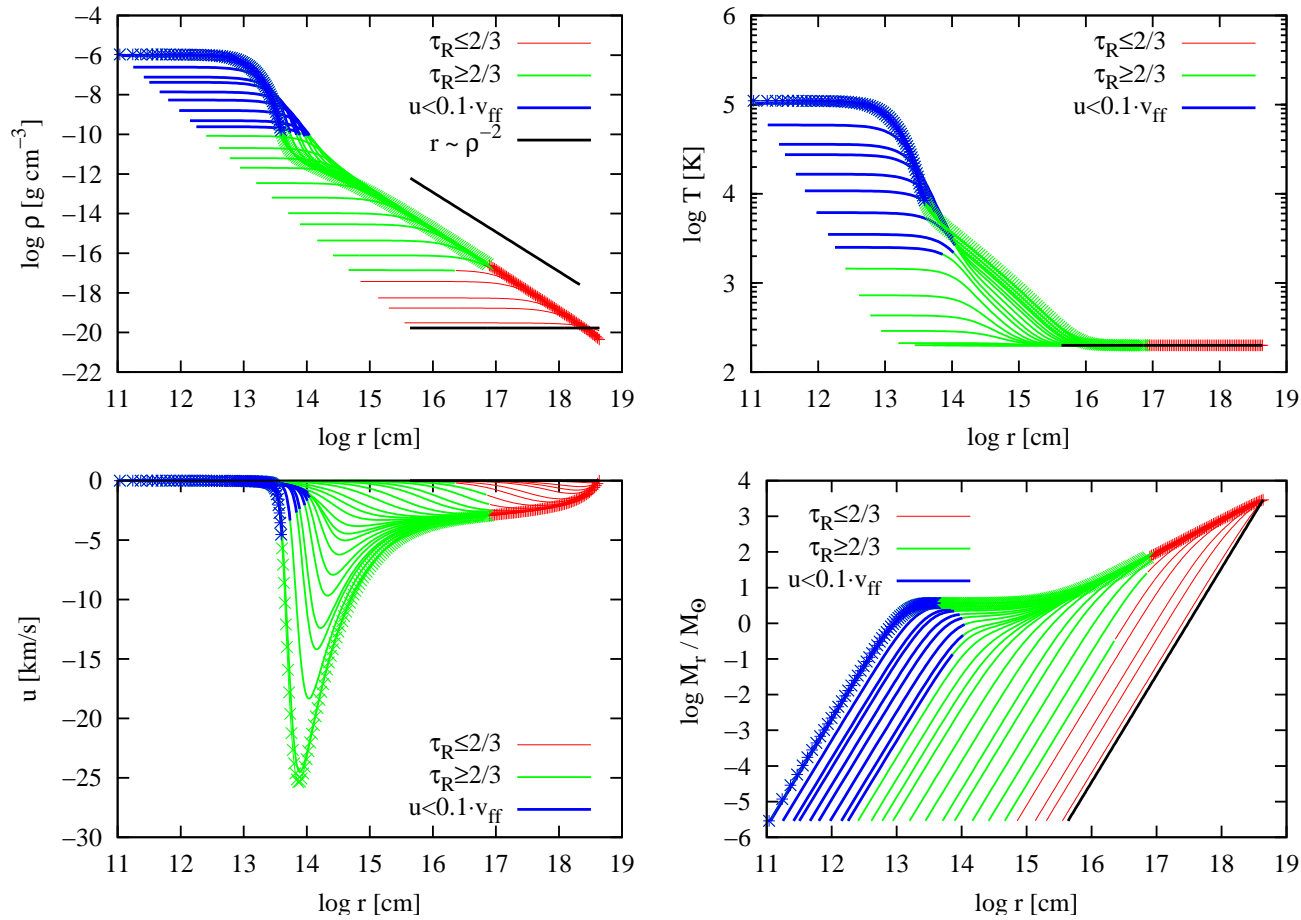


Abbildung 6.1: Modellrechnung mit konstanter Opazität. Aufgetragen sind von oben links nach unten rechts jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate  $r$  der Wolke die Entwicklung der Dichte  $\rho$ , Temperatur  $T$ , Radialgeschwindigkeit  $u$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ . Das Anfangsmodell (homogene, ruhende Wolke) ist mit einer schwarzen Linie dargestellt, beim letzten Modell wurde die Lage der Gitterpunkte durch Kreuze gekennzeichnet. Das Dichteprofil verläuft nahezu mit  $\rho \sim r^{-2}$ , wie anhand der Hilfslinie in der Abbildung links oben zu erkennen ist.

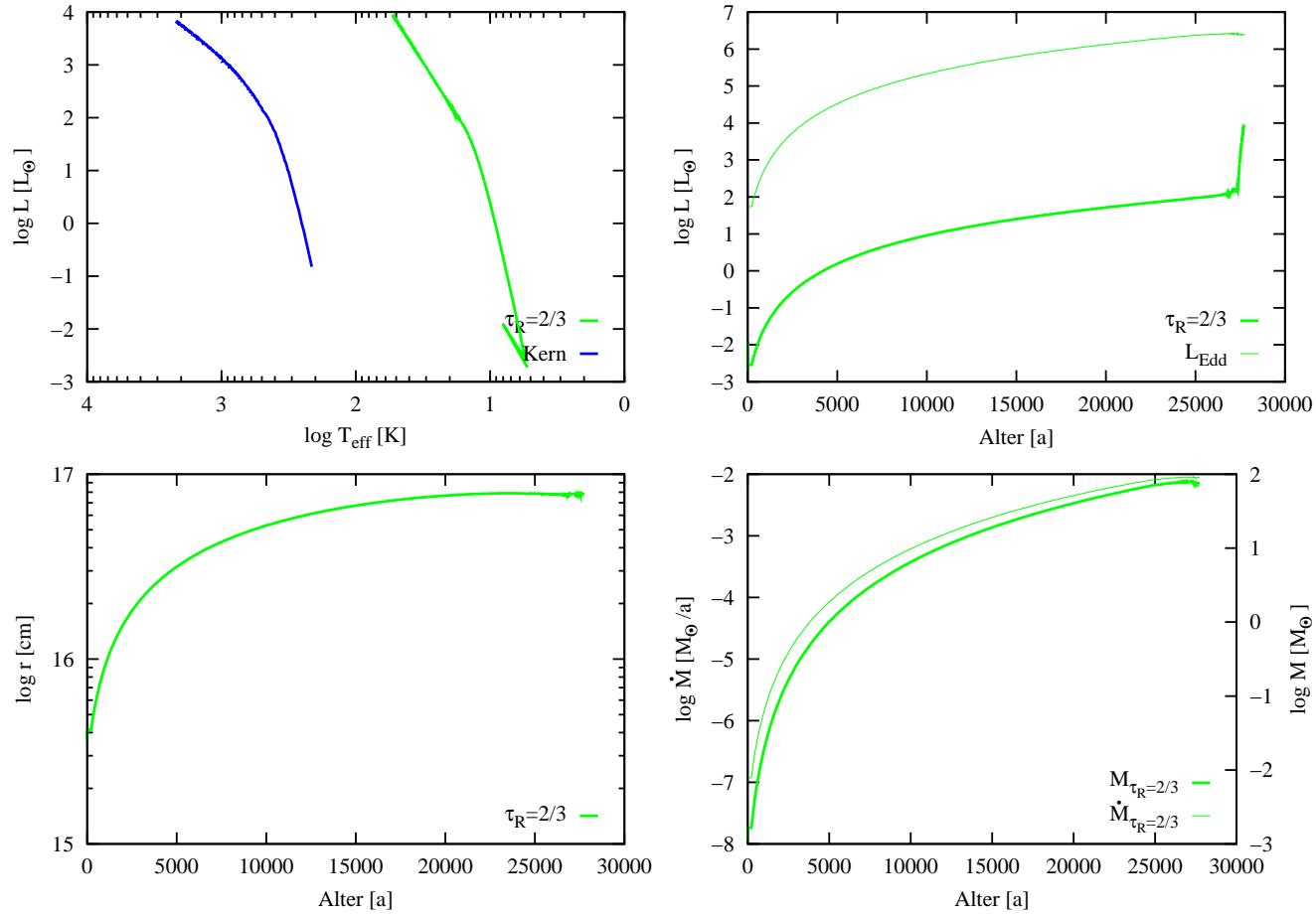


Abbildung 6.2: Modellrechnung mit konstanter Opazität. Entwicklung des Protosterns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit.

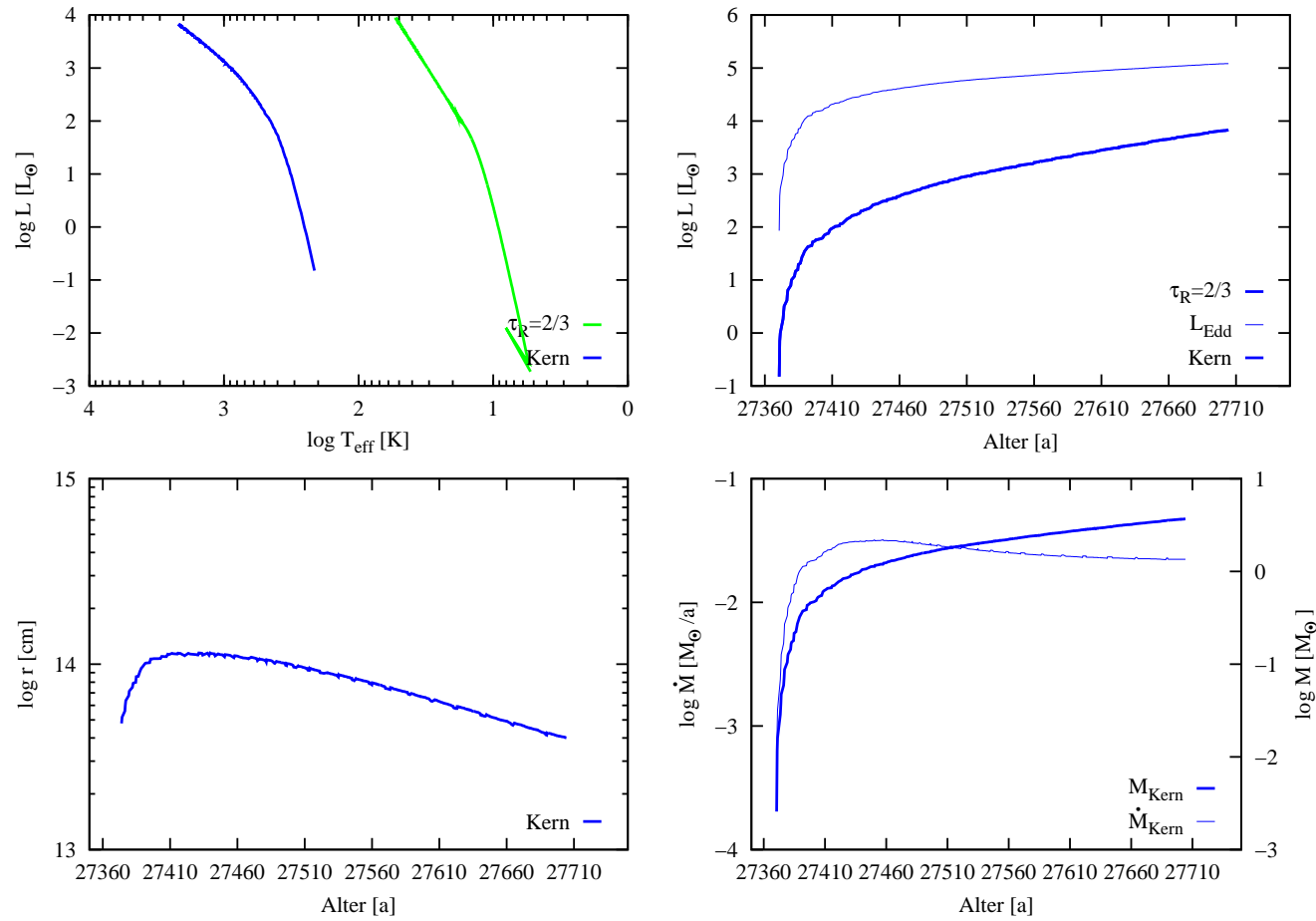


Abbildung 6.3: Modellrechnung mit konstanter Opazität. Entwicklung des hydrostatischen Kerns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit.

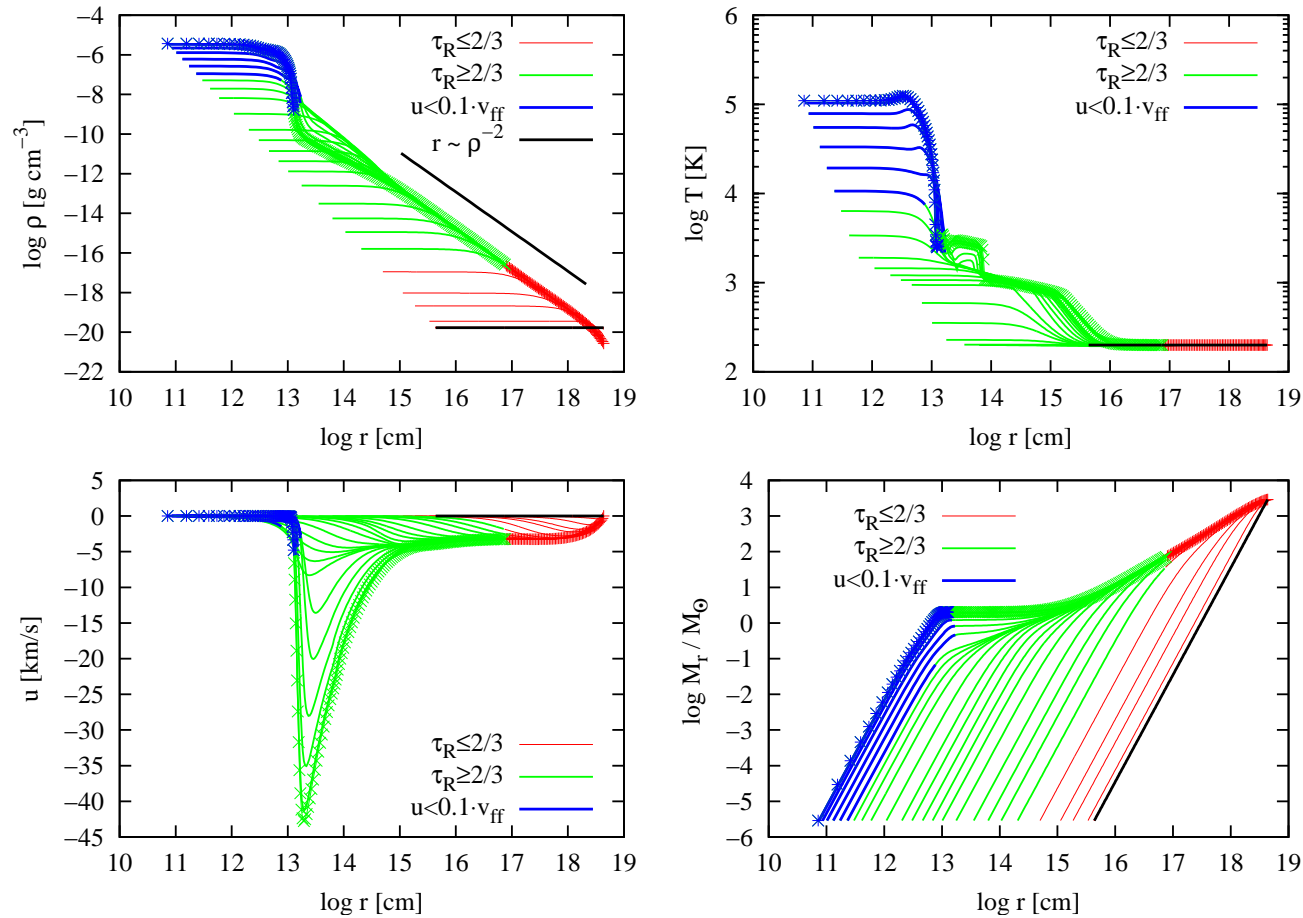


Abbildung 6.4: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Aufgetragen sind von oben links nach unten rechts jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate  $r$  der Wolke die Entwicklung der Dichte  $\rho$ , Temperatur  $T$ , Radialgeschwindigkeit  $u$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ . Das Anfangsmodell (homogene, ruhende Wolke) ist mit einer schwarzen Linie dargestellt, beim letzten Modell wurde die Lage der Gitterpunkte durch Kreuze gekennzeichnet. Das Dichteprofil verläuft nahezu mit  $\rho \sim r^{-2}$ , wie anhand der Hilfslinie in der Abbildung links oben zu erkennen ist.

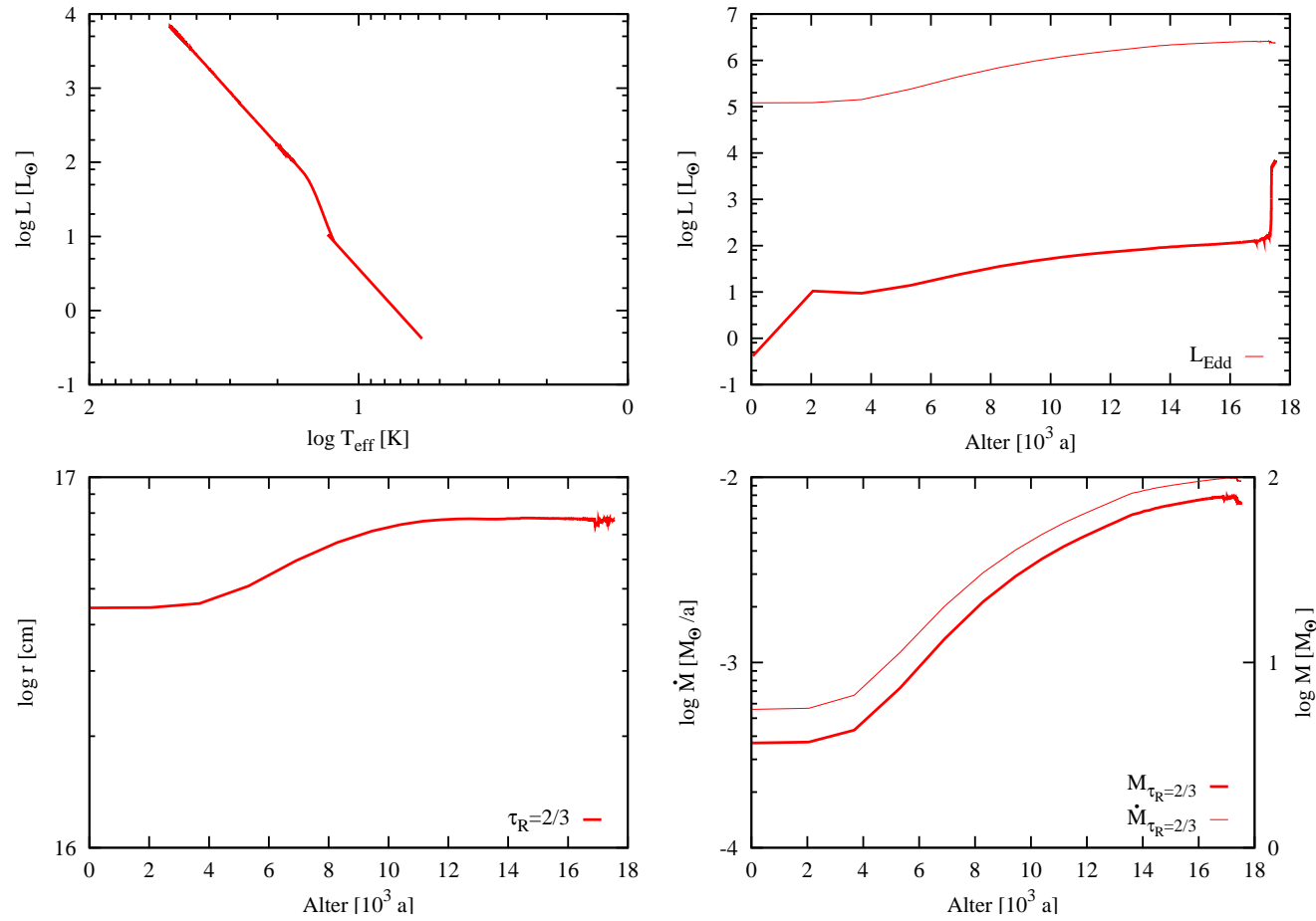


Abbildung 6.5: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Entwicklung der Staubhülle. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit.



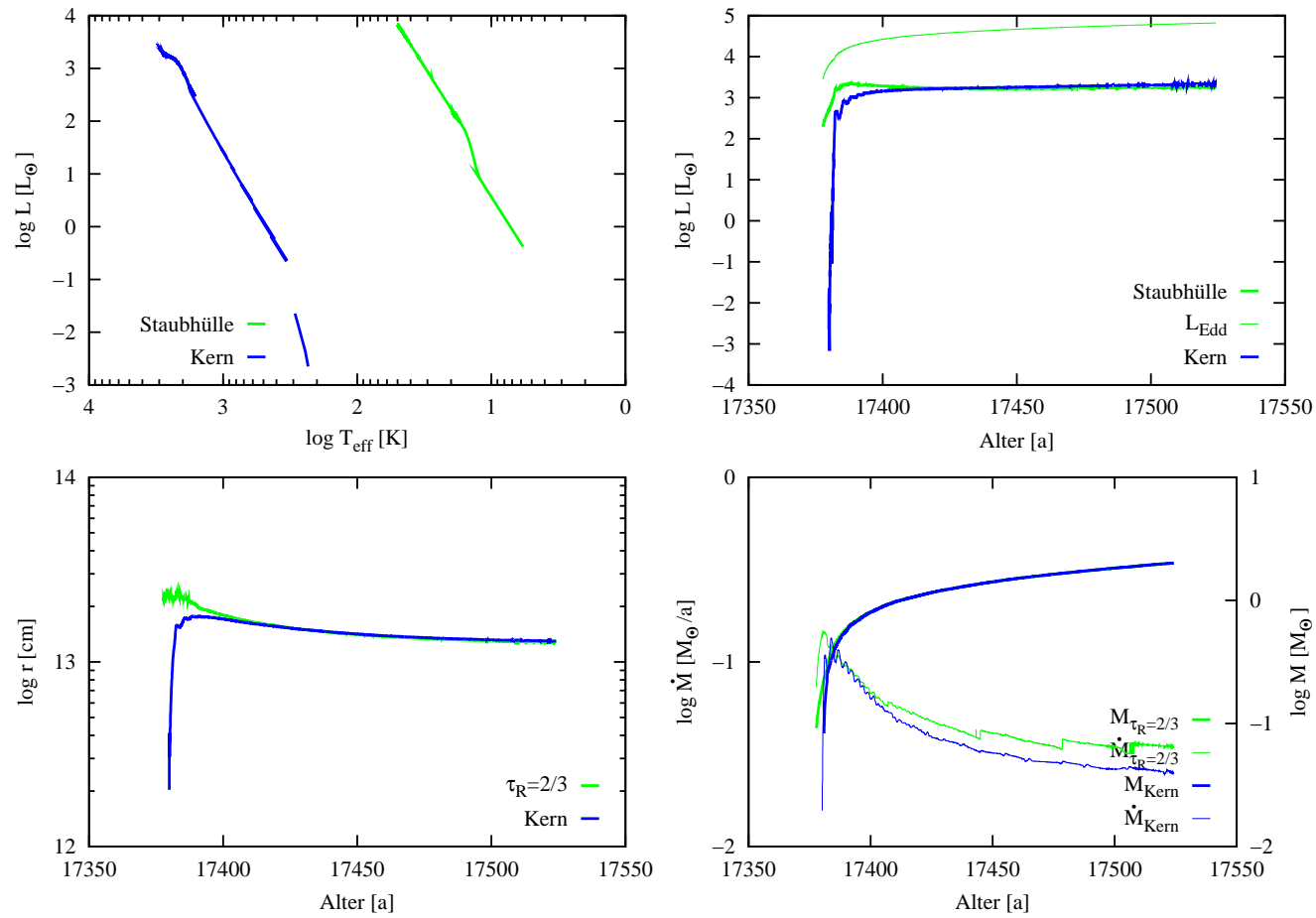


Abbildung 6.6: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Entwicklung des Protosterns und des hydrostatischen Kerns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit. Da der Protostern und der hydrostatische Kern beinahe identisch sind, fallen die Kurven von Masse und Radius ab einem bestimmten Zeitpunkt praktisch zusammen.

der Staubhülle und dem eigentlichen Protostern zu unterscheiden. Die Oberfläche der Staubhülle wird an der Stelle  $R_\tau$  definiert, an der  $\tau_R$  erstmals von außen her gesehen den Wert  $2/3$  annimmt, die Oberfläche des Protosterns an der Stelle, an der, bei einer Temperatur von 1500 K beginnend, d.h. von der Innenkante der Staubhülle an, die nach innen gemessene optische Tiefe erneut den Wert  $2/3$  annimmt<sup>3</sup>.

Auch in diesem Fall bildet sich ein hydrostatischer Kern im Sinne der Definitionsgleichung (6.5). Im Gegensatz zu dem Modell mit konstanter Opazität sind der hydrostatische Kern und der Protostern, was Alter, Masse und Ausdehnung angeht, von ähnlicher Größenordnung.

### PopIII-Opazität

Bei den Modellen mit primordialer Opazität ist im Gegensatz zu den anderen Modellen die optisch dünne Entwicklungsphase nicht isotherm, die Zentraltemperatur beträgt beim erstmaligen Erreichen von  $\tau_R = 2/3$   $T_c = 1660$  K. Der hydrostatische Kern bildet sich kurz danach bei einer Zentraltemperatur von  $T_c = 3093$  K (Zentraldichte von  $\rho_c = 1.54 \cdot 10^{-7} \text{g cm}^{-3}$  gegenüber  $T_c = 1196$  K,  $\rho_c = 7.25 \cdot 10^{-11} \text{g cm}^{-3}$  und  $T_c = 4068$  K,  $\rho_c = 3.13 \cdot 10^{-8} \text{g cm}^{-3}$  im Falle von  $\kappa_{e^-}$  bzw.  $\kappa_{\text{PopI}}$ ). Die Entwicklungszeit des Kerns ist im Vergleich zum Alter sehr kurz, der Zeitpunkt seiner Entstehung hängt von der Opazität ab.

Die Abbildungen 6.2, 6.6 und 6.8 zeigen die Entwicklung des Protosterns im HR-Diagramm, die zeitliche Entwicklung der Leuchtkraft, des Radius des Protosterns, seiner Masse und der Massenakkretionsrate auf den Protostern.

Die Leuchtkraft  $L$  und die Effektivtemperatur  $T_{\text{eff}}$  können nach Gleichungen (6.3) und (6.4) berechnet werden, wenn zugleich das erste Moment der Strahlungsintensität  $H$  (Gleichung 2.11) und der Photosphärenradius  $R_{\tau=2/3}$  bekannt sind. Letztere Größe wird über die optische Tiefe  $\tau_R$  bestimmt, und zwar von außen nach innen gemessen gemäß Gleichung (6.2). Sobald erstmals der Wert  $2/3$  überschritten wird, wird die Lage dieses Punktes folgendermaßen bestimmt: Die genaue Stelle, an der  $\tau_R = 2/3$  gilt, muss innerhalb der Gitterzelle liegen, die auf der Innenseite durch einen  $\tau_R$ -Wert über  $2/3$ , außen durch einen  $\tau_R$ -Wert unter  $2/3$  begrenzt wird; die genaue Lage des Photosphärenradius in dieser Zelle wird mittels linearer Interpolation berechnet. Ist der Wert von  $R_\tau$  bekannt, kann die Leuchtkraft  $L$  und die Effektivtemperatur  $T_{\text{eff}}$  nach Gleichungen (6.3) und (6.4) berechnet werden.  $M_\tau$  ist die Masse innerhalb von  $R_\tau$ , sie wird ebenfalls mittels linearer Interpolation berechnet. Bedauerlicherweise ist bei dieser Art der Berechnung ein gewisses "Rauschen" nicht zu vermeiden. Das liegt aber nicht daran, dass die Modelldaten numerische Oszillationen zeigen, sondern an der Ungenauigkeit der Lokalisierung durch lineare Interpolation in dem bewegten Gitter.

In den Abbildungen 6.3, 6.6 und 6.8 werden das Hertzsprung-Russell-Diagramm und die zeitliche Entwicklung der Leuchtkraft des hydrostatischen Kerns gezeigt. Ferner werden die Entwicklungen der Masse und des Radius des Protosterns ( $\tau_R \geq 2/3$ )  $M_\tau$  bzw.  $r_\tau$  und des hydrostatischen Kerns ( $u < 0,1u_{\text{ff}}$ )  $M_{\text{Kern}}$  bzw.  $r_{\text{Kern}}$  abgebildet; bei

---

<sup>3</sup>Für diesen Fall wurde die optische Tiefe ab der Stelle berechnet, an der die Temperatur erstmals 1500 K erreicht (die genaue Stelle wird wie auf der nächsten Seite beschrieben mittels linearer Interpolation bestimmt).

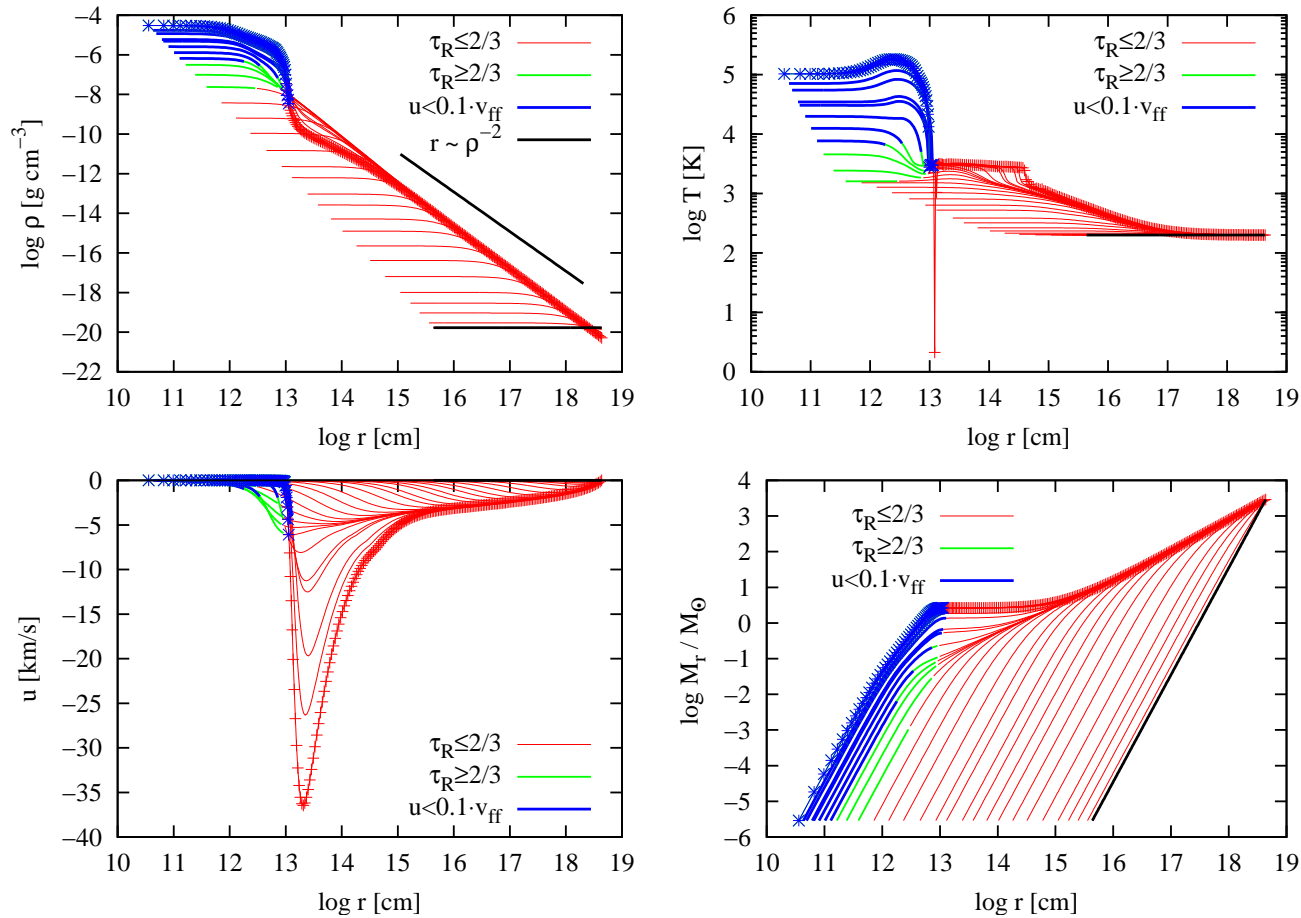


Abbildung 6.7: Modellrechnung mit PopIII-Opazität. Aufgetragen sind von oben links nach unten rechts jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate  $r$  der Wolke die Entwicklung der Dichte  $\rho$ , Temperatur  $T$ , Radialgeschwindigkeit  $u$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ . Das Anfangsmodell (homogene, ruhende Wolke) ist mit einer schwarzen Linie dargestellt, beim letzten Modell wurde die Lage der Gitterpunkte durch Kreuze gekennzeichnet. In diesem Fall ist die Abweichung vom  $\rho \sim r^{-2}$ -Verlauf des Dichteprofiles am ausgeprägtesten, wie anhand der Hilfslinie in der Abbildung links oben zu erkennen ist.

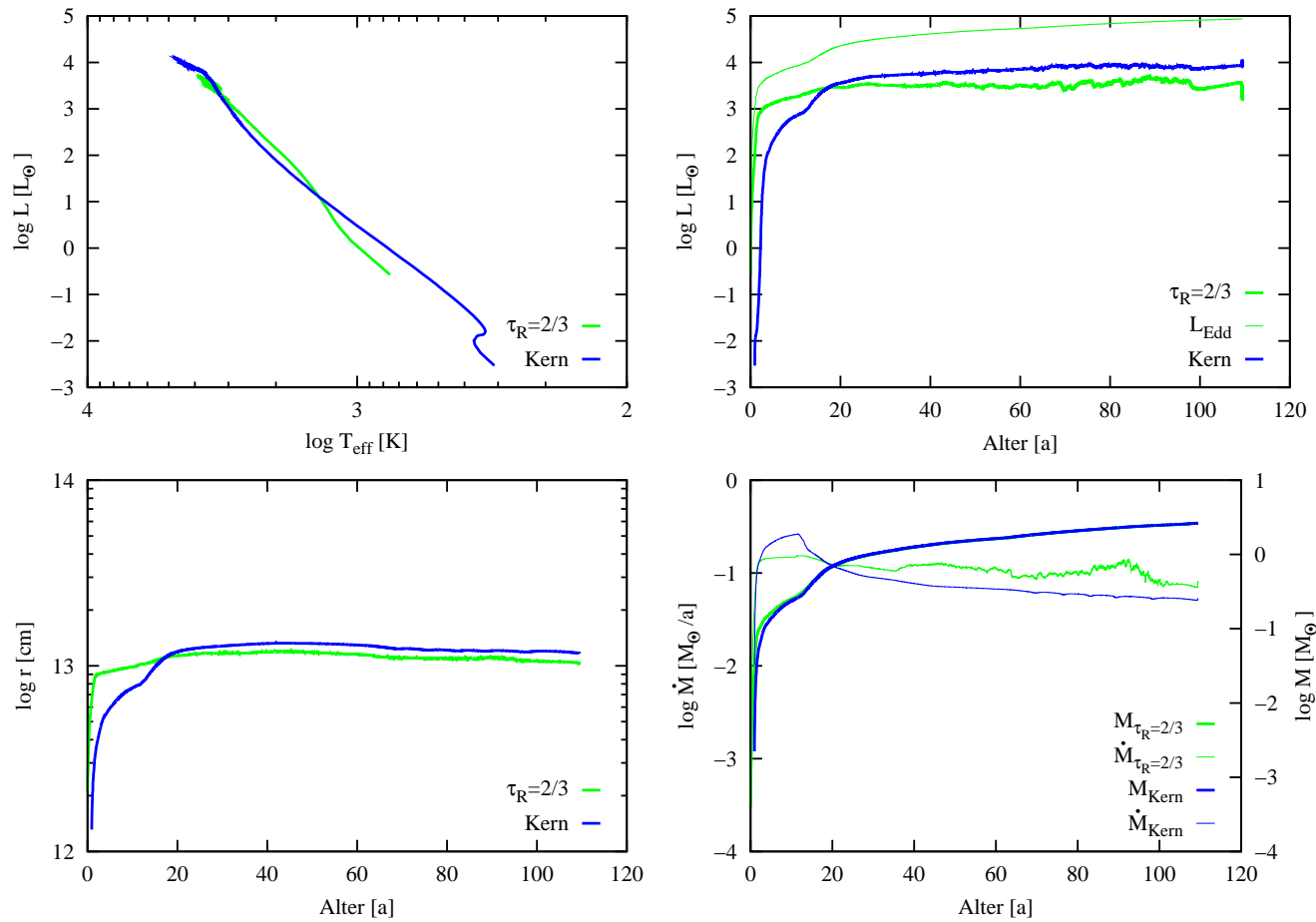


Abbildung 6.8: Modellrechnung mit PopIII-Opazität. Entwicklung des Protosterns und des hydrostatischen Kerns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit. Da der Protostern und der hydrostatische Kern sehr ähnlich sind, fallen die Kurven von Masse und Radius ab einem bestimmten Zeitpunkt beinahe zusammen. Diese Kurven sind aufgrund des im Text erläuterten Rauschens geglättet.

den Modellen mit PopI-Opazität wird zwischen dem hydrostatischen Kern und der Staubhülle unterschieden (Abbildungen 6.6 und 6.5).

Schließlich wird in Abbildung 6.9 zu Vergleichszwecken der Anfangs- und Endzustand (Erreichen einer Zentraltemperatur  $T_c = 10^5$  K) der Modelle mit unterschiedlichen Opazitäten gezeigt. Bei allen Simulationsrechnungen handelt es sich um Modelle mit einer Anfangstemperatur von  $T_{\text{init}} = 200$  K und Anfangsteilchendichte von  $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ , die sich nur durch die angenommene Näherung für die Opazität unterscheiden.

Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Aufgelistet sind neben den Anfangswerten die Gesamtmasse der Gaswolke, die Masse des Protosterns am Ende der Rechnung, sowie die Masse des hydrostatischen Kerns. Während die Zahlenwerte des hydrostatischen Kerns für alle Modelle von ähnlicher Größenordnung sind, weichen die von  $M_\tau$  stark voneinander ab, was an der Definition dieser Größe liegt.

### 6.2.2 Einfluss der Anfangsbedingungen

Gegenstand dieses Abschnitts sind Modellrechnungen mit unterschiedlichen Anfangswerten der Strukturvariablen. Sie wurden durchgeführt, um den Einfluss der Anfangsbedingungen auf die Entwicklung des Protosterns zu untersuchen.

Es stellt sich heraus, dass die Wahl der Anfangswerte nur geringen Einfluss auf die Entwicklung hat. Wie in Ripamonti et al. [50] bereits festgestellt, geht während der isothermen Phase die Erinnerung an die Anfangsbedingungen verloren.

1. **Opazität variabel** Modelle, die sich nur durch die Opazität unterscheiden, wurden im vergangenen Abschnitt ausführlich beschrieben. Die Anfangs- und Endstadien der Simulationsrechnungen sind in Abbildung 6.9 zu sehen.
2. **Anfangstemperatur konstant, Anfangsteilchendichte und Opazität variabel** Bei Modellen mit gleicher Anfangstemperatur ( $T_{\text{init}} = 200$  K), aber unterschiedlicher Anfangsteilchendichte ( $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_{\text{init}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_{\text{init}} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ ) ist besonders gut sichtbar, dass die Erinnerung an die Anfangsbedingungen während der isothermen Anfangsphase verloren geht (Abbildungen 6.10 bis 6.12).

Während der isothermen Anfangsphase steigt die Dichte um mehrere Größenordnungen bevor die Wolke optisch dick wird; in diesem Sinne entsprechen die Modelle mit der höheren Anfangsteilchendichte den späteren Entwicklungsphasen eines Modells mit geringerer Anfangsteilchendichte. Die Entwicklung verläuft, wie beispielsweise in Abbildung 6.10 zu sehen ist, in allen Fällen nahezu gleich. Bedingt durch die Konstruktion der Modelle haben die Modelle mit höherer Anfangsteilchendichte eine geringere Gesamtmasse und damit einen kleineren Gesamtradius.

Auch diese Modellrechnungen wurden beendet, sobald die Zentraltemperatur  $10^5$  K erreicht hat. Zu diesem Zeitpunkt der Entwicklung sind sie Modelle, abgesehen von der Lage des Außenradius, nicht voneinander zu unterscheiden.

3. **Anfangsteilchendichte konstant, Anfangstemperatur und Opazität variabel**

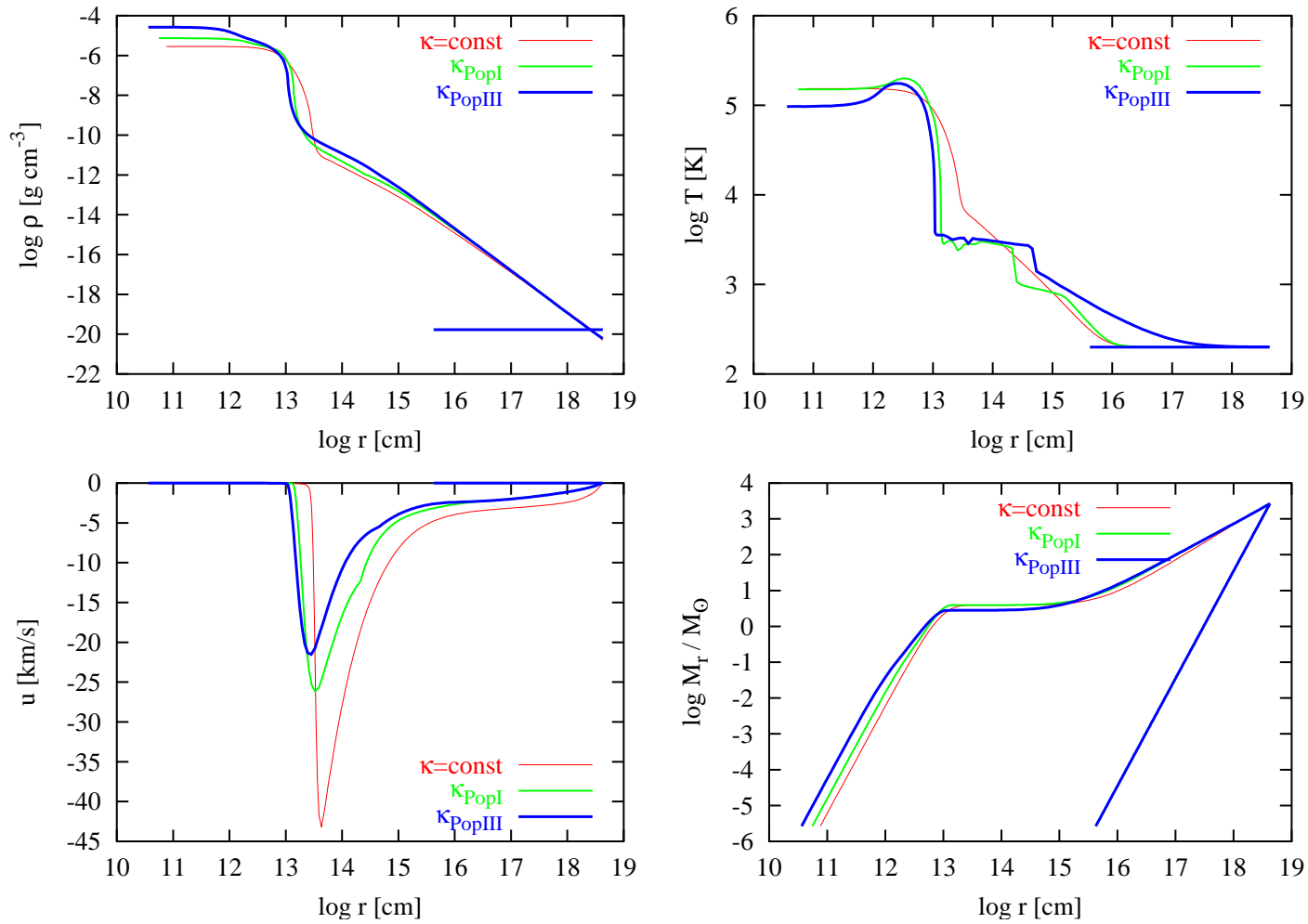


Abbildung 6.9: Anfangs- und Endstadien der Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk mit unterschiedlichen Opazitäten für  $T_{\text{init}} = 200$  K und  $n_{\text{init}} = 10^4$  cm $^{-3}$ .

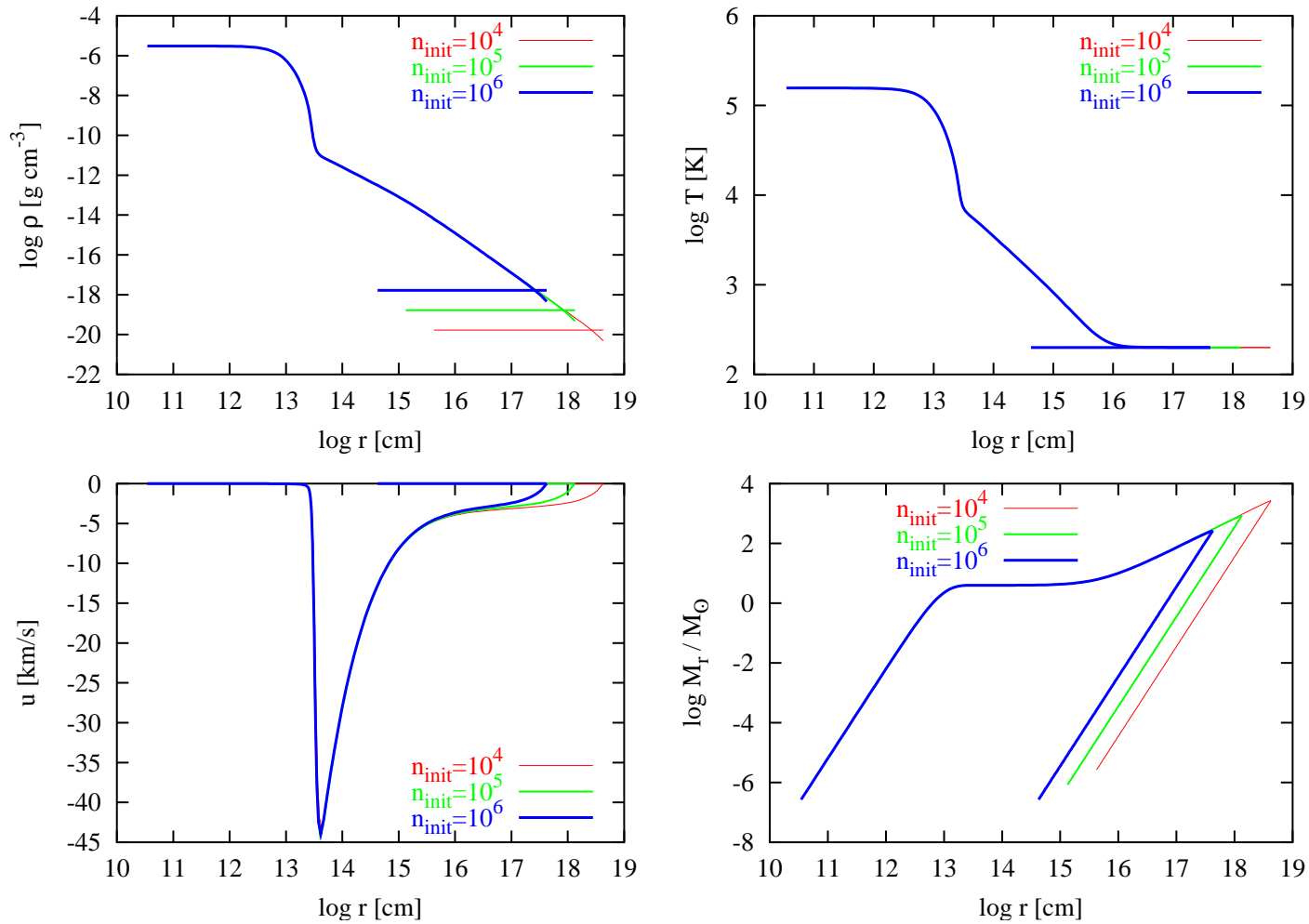


Abbildung 6.10: Modellrechnungen mit konstanter Opazität und Anfangstemperatur von 200 K, die Anfangsteildichte betrug  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^5 \text{ cm}^{-3}$ , und  $10^6 \text{ cm}^{-3}$ . Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

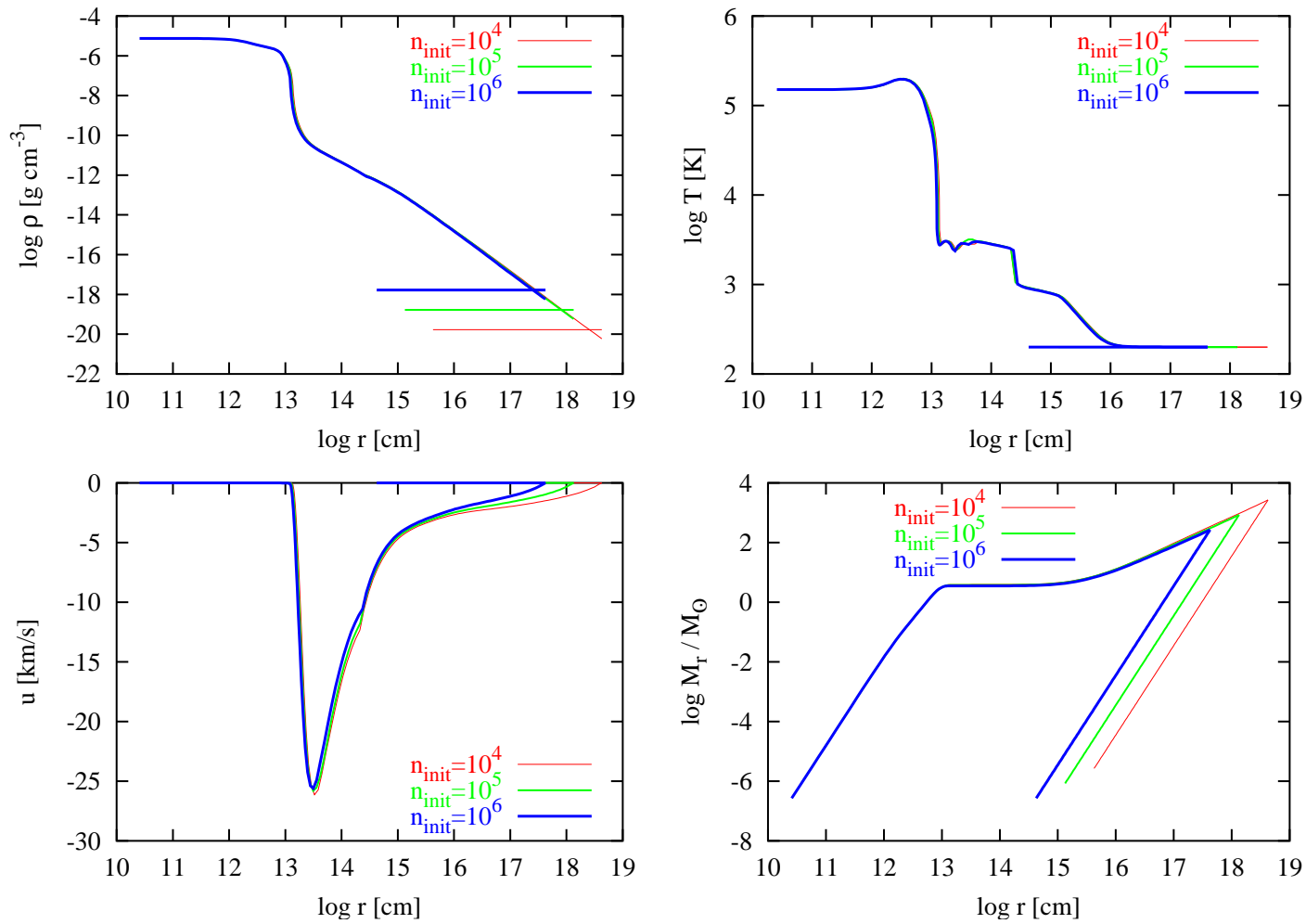


Abbildung 6.11: Modellrechnungen mit PopI-Opazität und konstanter Anfangstemperatur von 200 K, die Anfangsteilchendichte betrug  $10^4$  cm $^{-3}$ ,  $10^5$  cm $^{-3}$ , und  $10^6$  cm $^{-3}$ . Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.



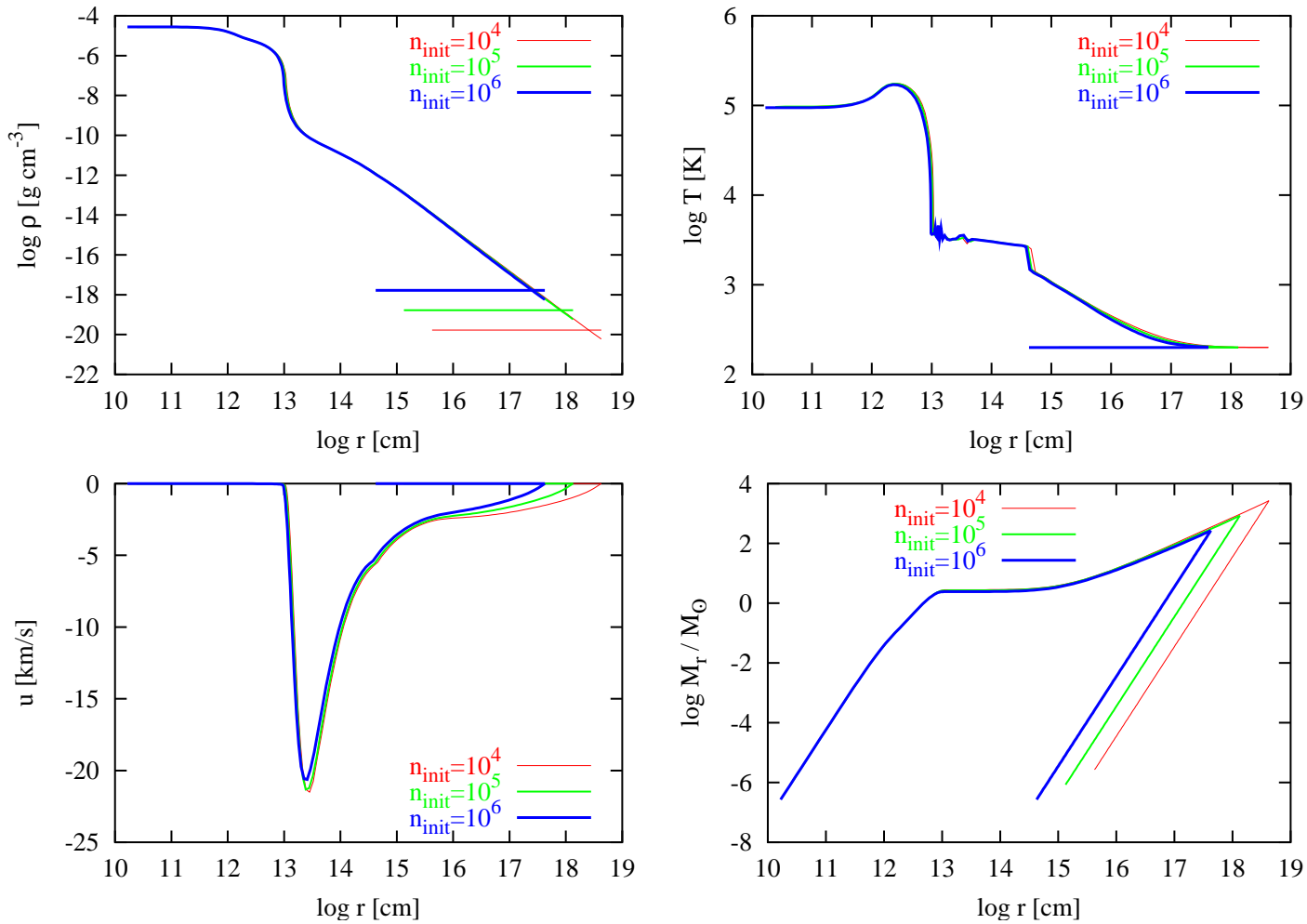


Abbildung 6.12: Modellrechnungen mit PopIII-Opazität und konstanter Anfangstemperatur von 200 K, die Anfangsteildichte betrug  $10^4$  cm $^{-3}$ ,  $10^5$  cm $^{-3}$ , und  $10^6$  cm $^{-3}$ . Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

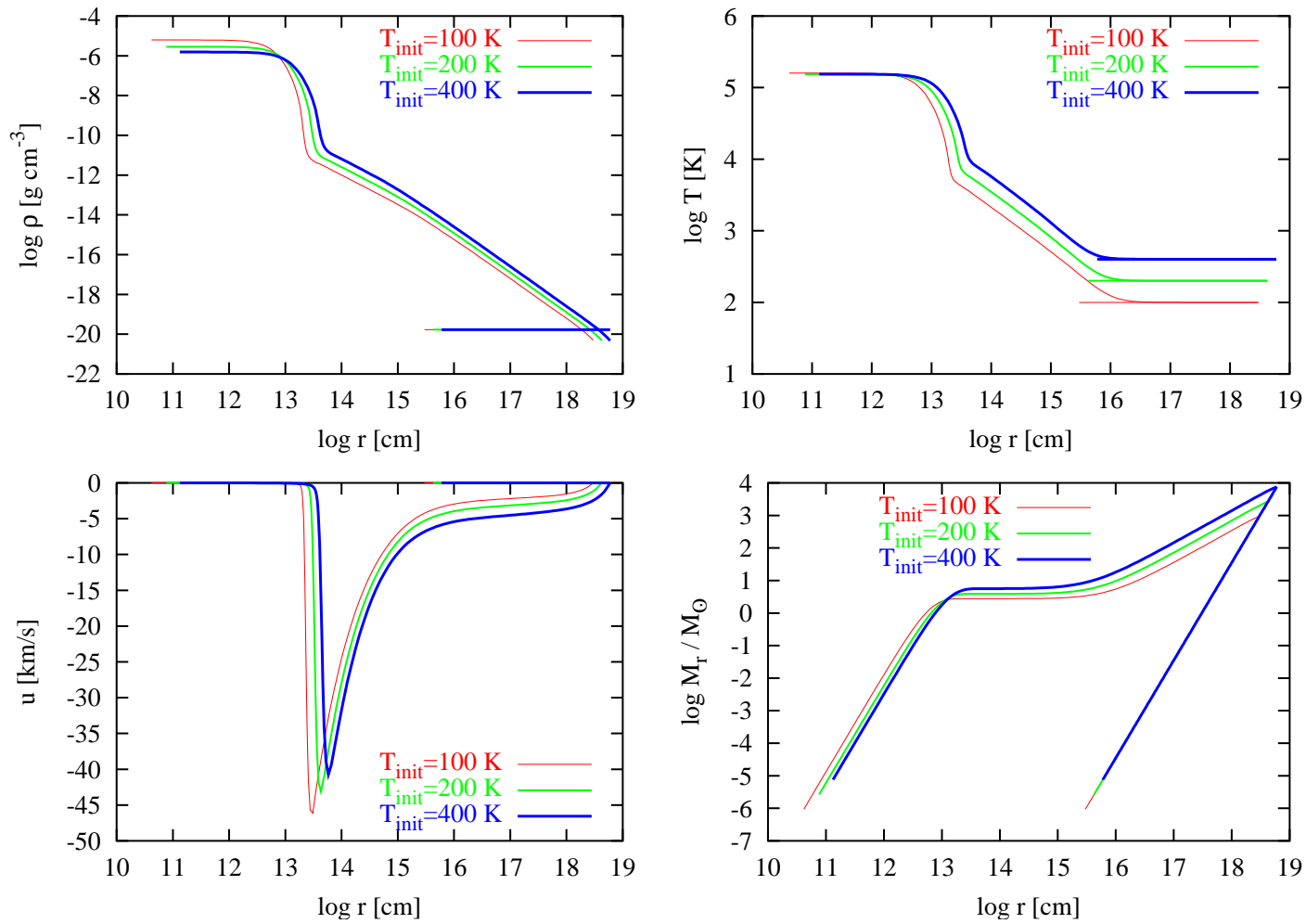


Abbildung 6.13: Modellrechnungen mit konstanter Opazität und Anfangsteildichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , die Anfangstemperatur betrug 100 K, 200 K und 400 K. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

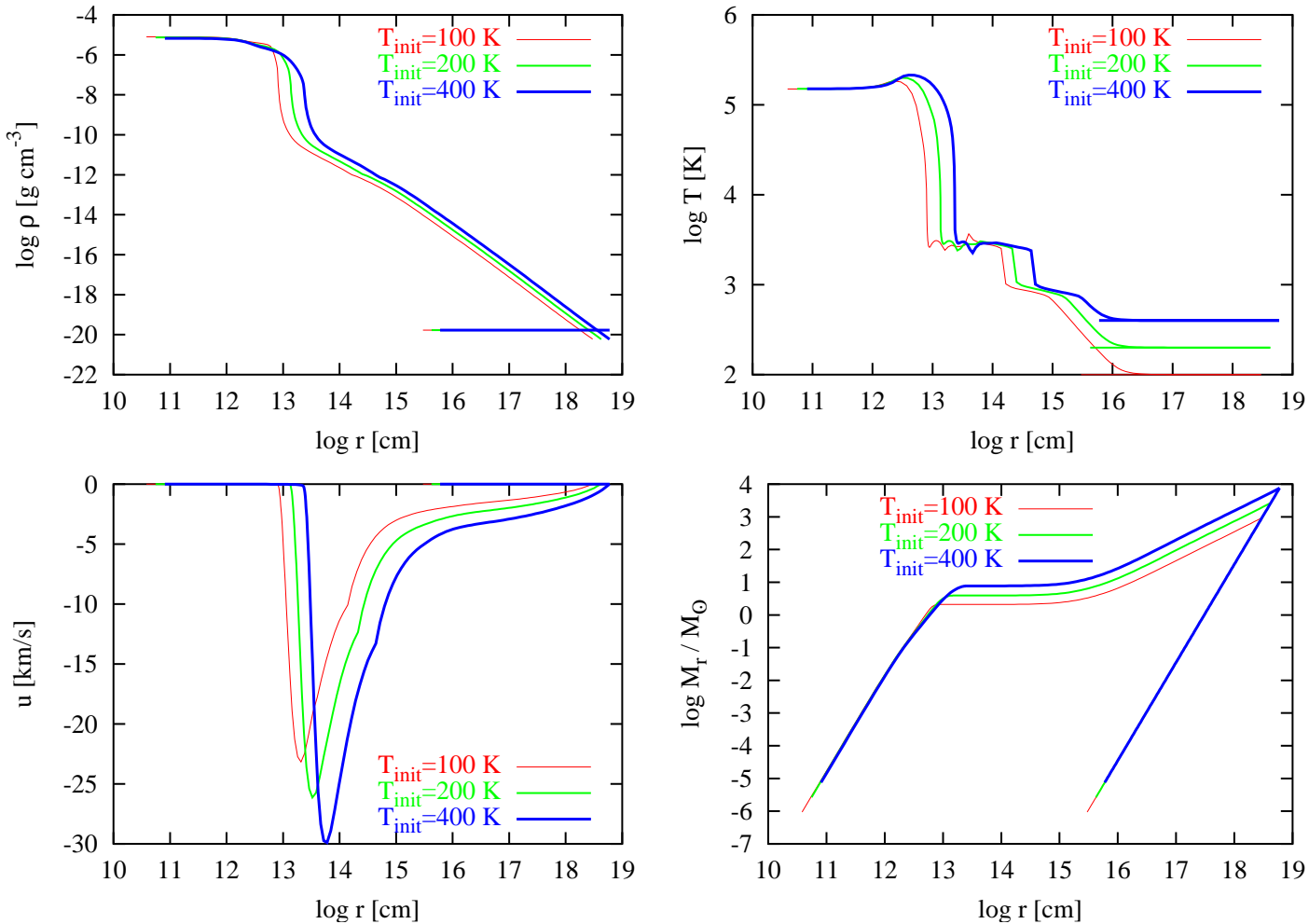


Abbildung 6.14: Modellrechnungen mit PopI-Opazität nach Gleichung (2.14) und Anfangsteildichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , die Anfangstemperatur betrug 100 K, 200 K und 400 K. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

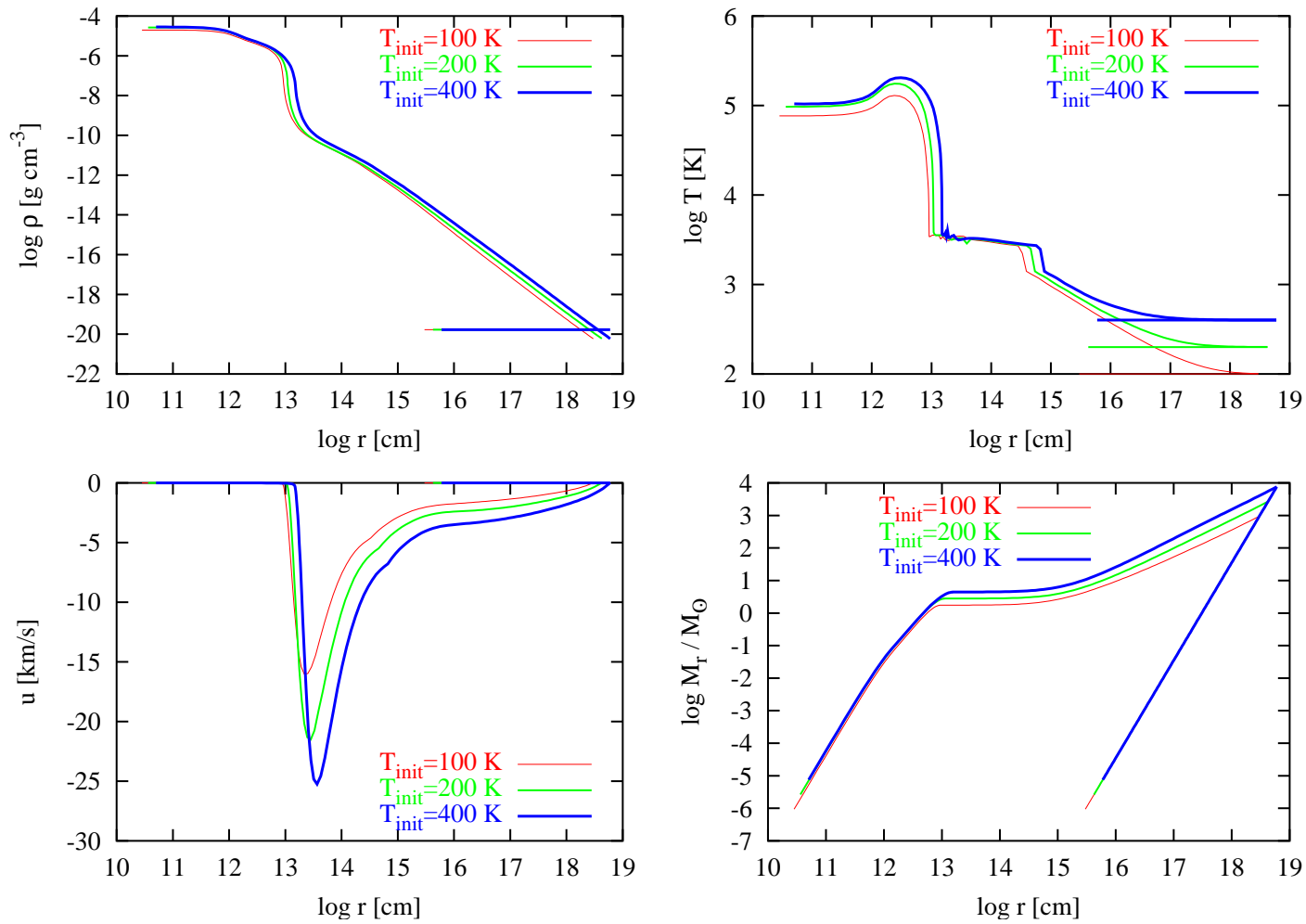


Abbildung 6.15: Modellrechnungen mit PopIII-Opazität und Anfangsteildichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$ , die Anfangstemperatur betrug 100 K, 200 K und 400 K. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

Bei Modellen, die sich bei gleicher Anfangsteildichte durch unterschiedliche Anfangstemperatur unterscheiden (Abbildungen 6.13 bis 6.15), sind die Unterschiede in der Entwicklung nur quantitativer Natur.

Die Abbildungen 6.10 bis 6.15 entsprechen den Abbildungen 6.1 bis 6.7 mit dem Unterschied, dass hier nur Anfangs- und Endzustand der Rechnungen aufgetragen sind. Auch diese Modellrechnungen wurden bei Erreichen der Zentraltemperatur von  $1,5 \cdot 10^5$  K beendet.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass die Modelle nur eine geringe Abhängigkeit von der speziellen Wahl der Anfangsbedingungen zeigen.

### 6.2.3 Vergleich mit früheren Rechnungen

Die Modelle ohne chemisches Netzwerk sind nur bedingt mit denen vom Omukai und Nishi [42] oder Ripamonti et al. [50] vergleichbar. Dennoch kann bereits mit Hilfe dieser Modelle Folgendes festgehalten werden:

- In allen Fällen kollabiert die anfangs gravitativ instabile Wolke und bildet einen optisch dicken und einen hydrostatischen Kern, in denen nur ein sehr geringer Teil der Gesamtmasse enthalten sind. Unabhängig vom angenommenen Absorptionskoeffizienten findet der Kollaps nahezu im freien Fall statt. Die Bildung von massereichen PopIII-Sternen wäre nach den Ergebnissen dieser Modellrechnungen, selbst ohne die chemische Entwicklung einzubeziehen, möglich.
- Die Wahl der Anfangsbedingungen spielt für das Endergebnis keine wesentliche Rolle.
- Die Benutzung einer künstlichen Viskosität führt zur Ausschmierung des Stoßes über mehrere Gitterzellen, so dass der Stoß nur näherungsweise berechnet wird. Sowohl Omukai und Nishi [42] als auch Ripamonti et al. [50] verwenden in ihren Simulationsrechnungen starre Lagrange-Gitter (d.h. die Masse innerhalb einer Gitterzelle bleibt über die gesamte Rechnung konstant); in dieser Arbeit kann der (wandernde) Stoß mit Hilfe des adaptiven Gitters deutlich feiner aufgelöst werden und zwar gemäß den Anforderungen der zu jedem Zeitpunkt der Rechnung vorliegenden Strukturen. Bei einem starren Gitter müssen dessen Eigenschaften von Anfang an und für die gesamte Rechnung festgelegt werden, so wählen Ripamonti et al. im Bereich des zu erwartenden Stoßes eine etwas feinere Auflösung, die aber bei (noch) nicht vorhandenen Strukturen eher hinderlich ist.
- Bei den Arbeiten von Omukai und Nishi [42] und Ripamonti et al. [50] wird aufgrund der CFL-Bedingung die Entwicklung des Kerns nur noch näherungsweise verfolgt, indem eine selbstähnliche Larson-Penston-artige Lösung angenommen wird um die Massenakkretionsrate abzuschätzen.

In der hier vorliegenden Arbeit entfällt die CFL-Bedingung und die daraus resultierenden Beschränkungen, da ein implizites Lösungsverfahren verwendet wird. Die einzige Vorgabe ist die der Gesamtmasse der Wolke und ihrer Anfangstemperatur (die für die Entwicklung des Protosterns keine wichtige Rolle spielt); alle

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

---

weiteren Größen – Alter, Effektivtemperatur, Masse und Radius (Protostern und hydrostatischer Kern) – ergeben sich aus der Lösung der strahlungshydrodynamischen Gleichungen ohne weitere Näherungen (Stoß ausgeschmiert, Strahlungstransport grau). In diesem Sinne wurde hier erstmals eine völlig konsistente Lösung erhalten.

- Mit eindimensionalen Modellrechnungen ist der Frage nach einer eventuellen Fragmentation der Wolke nicht nachzugehen.

### 6.3 Modellrechnungen mit Strahlungshydrodynamik und zeitabhängiger chemischer Entwicklung

Die Modellrechnungen, die in diesem Abschnitt vorgestellt werden, entsprechen den Modellen aus Abschnitt 6.2, mit dem Unterschied, dass hier die chemische Entwicklung mit einbezogen wurde. Die Konstruktion der Modelle ist identisch, es wurde wie in Abschnitt 6.2 verfahren, die Anfangswerte der Strukturvariablen sind die gleichen. Wie bereits erwähnt, nimmt primordiales Gas eine charakteristische Temperatur von 200 K und Teilchendichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  an. Die Ergebnisse von Simulationsrechnungen mit diesen Anfangswerten werden ausführlicher beschrieben, der Einfluss unterschiedlicher Anfangswerte wird in Abschnitt 6.4 besprochen.

Die Kollapsrechnung wurde bis zu dem Punkt durchgeführt, in dem die Zentraltemperatur  $10^5 \text{ K}$  erreicht hat. Die chemischen Prozesse spielen am Beginn der Entwicklung eine wichtige Rolle, insbesondere im primordialen Fall, da hier die Fähigkeit des Gases, die während der Kontraktion entstehenden Kompressionsenergie abzustrahlen, von der chemischen Zusammensetzung beeinflusst wird. Wenn die Zentraltemperatur  $10^5 \text{ K}$  erreicht hat, existiert bereits ein klar ausgeprägter Kern, der fast ausschließlich aus ionisiertem Wasserstoff besteht und durch Akkretion an Masse zunimmt. Die weitere Entwicklung im zentralen Bereich der Konfiguration zu einem massereichen Stern hängt dann nicht mehr von den Details der chemischen Entwicklung in der äußeren Hülle ab und wurde deswegen nicht weiter verfolgt, da diese Phase nicht mehr Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist. Außerdem ist die in den Modellen implementierte Zustandsgleichung eines idealen Gases immer weniger gerechtfertigt, da mit zunehmender Dichte nichtlineare Effekte wie beispielsweise Druckionisation (siehe Saumon, Chabrier, van Horn [52]) auftreten. So sind bei einer Temperatur von  $T = 10^5 \text{ K}$  und Dichte von  $\rho = 1 \text{ g cm}^{-3}$  die Beiträge von Temperatur- und Druckionisation von etwa gleicher Größenordnung. Die Annahme eines idealen Gases ist gerechtfertigt, sofern die Dichte  $\rho = 10^{-6} \text{ g cm}^{-3}$  nicht wesentlich überschreitet (Saumon, Chabrier, van Horn [52]).

Als Chemie wird eine erweiterte Wasserstoffchemie betrachtet, die die Spezies  $\text{H}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}^-$  und  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$  und  $\text{e}^-$  berücksichtigt. Die verwendeten Reaktionen sind in Tabelle 6.2 aufgelistet; genauere Einzelheiten zum chemischen Netzwerk finden sich in Anhang B. Dieses Netzwerk ist gegenüber dem von Omukai & Nishi [42] deutlich erweitert und berücksichtigt auch die Spezies  $\text{H}_2^+$  und  $\text{H}_3^+$ .

Als chemische Anfangszusammensetzung wurde ein  $\text{H}_2$ - bzw. Elektronenanteil von  $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-4}$  bzw.  $f_{\text{e}^-} = 1 \cdot 10^{-10}$  gewählt; der relative Anteil der geladenen Spezies  $\text{H}^-$ ,  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$  beträgt  $10^{-15}$ .  $f_{\text{H}^+}$  wird so gewählt, dass das Gas insgesamt elektrisch

neutral ist. Das restliche Gas besteht aus atomarem Wasserstoff, siehe auch Tabelle 3.1. Der Wert von  $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-4}$  wurde gewählt, weil Rechnungen wie die von Norman, Abel und Bryan [40] (Strukturbildung, Bildung erster Sterne) oder die von Abel et al. [2], [1] Bromm et al. [9] (kosmologischen Strukturbildung) zu dem Schluss kamen, dass diese Häufigkeit die Schwelle darstellt, ab der die Kühlung durch molekularen Wasserstoff ausreichend effizient ist, um den Kollaps von primordialen Objekten zu ermöglichen (siehe auch Abschnitt 3.5).

Ob eine protostellare Wolke kollabieren kann, hängt u.a. davon ab, ob die während der

Tabelle 6.2: Das chemische Netzwerk. Quellen: PSS (Palla, Salpeter, Stahler [43]), SLD (Stancil, Lepp, Dalgarno [59]), LSD (Lepp, Stancil, Dalgarno [32]), BCL (Bromm, Coppi, Larson [8]), PUY (Puy et al. [48]).

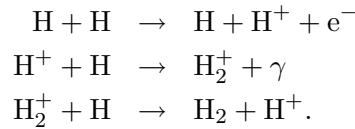
Reaktion	Quelle
$\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{e}^-$	BCL
$\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \gamma$	BCL
$\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^- + \gamma$	PUY
$\text{H}^- + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$	BCL
$\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H} + \text{H}$	BCL
$\text{H}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}^-$	BCL
$\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	PSS
$\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{H}$	BCL
$\text{H}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{e}^-$	BCL
$\text{H}^- + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{e}^- + \text{e}^-$	BCL
$\text{H}^- + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{e}^-$	BCL
$\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$	PUY
$\text{H} + \text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	PSS
$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}_2$	PSS
$\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$	PSS
$\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{H}$	PSS
$\text{H} + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$	SLD
$\text{H}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}$	SLD
$\text{H}^- + \gamma \rightarrow \text{H} + \text{e}^-$	LSD
$\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}$	SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$	SLD
$\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	SLD
$\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	SLD
$\text{H} + \gamma \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$	LSD
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{e}^-$	LSD
$\text{H}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$	SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	SLD
$\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_3^+ + \gamma$	SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}_3^+ + \gamma$	SLD
$\text{H}_3^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$	SLD

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

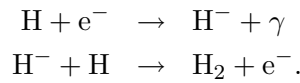
---

Kontraktion entstehende Kompressionswärme abgestrahlt werden kann. Bei primordialem Gas ist die Häufigkeit von molekularem Wasserstoff – des wichtigsten Kühlagens' – von entscheidender Bedeutung. Die Bildung von  $H_2$  kann über drei Kanäle stattfinden (s. Abschnitt 3.4.2):

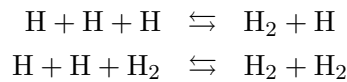
1. Protonen als Katalysator:



2. Elektronen als Katalysator:



3. Dreiteilchenprozesse:



Letztere sind bei hoher Dichte (ab  $n = 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ) der mit Abstand effizienteste Bildungsprozess von  $H_2$ ; über diesen Weg kann der gesamte Wasserstoff in die molekulare Form umgewandelt werden. Der  $H^-$ -Reaktionspfad ist etwas effizienter als der über  $H_2^+$ , wobei zu beachten ist, dass  $H^-$  aufgrund seiner geringen Dissoziationsenergie leichter abgebaut werden kann als  $H_2^+$  ( $E_{\text{diss},H^-} = 0,75 \text{ eV}$ ,  $E_{\text{diss},H_2^+} = 2,64 \text{ eV}$ ).

Bei allen Modellen ist zu beobachten, dass der Wasserstoff im kollabierenden Bereich vollständig von der atomaren in die molekulare Form übergeht, was eine Erhöhung der Kühlleistung in diesem Bereich zur Folge hat.

Ob die Entwicklung der Wolke empfindlich von der Anfangshäufigkeit von freien Protonen bzw. Elektronen abhängt, wurde anhand von Simulationsrechnungen, bei denen die Anfangshäufigkeit dieser chemischen Spezies variiert wurde, überprüft. Auch hier zeigt sich, dass die Wahl der Anfangswerte der Teilchendichte der chemischen Spezies keinen Einfluss auf das Endergebnis hatte (siehe Abbildung 6.32 und 6.33).

Insgesamt lässt sich sagen, dass – ähnlich wie bei den Modellrechnungen ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung – die Wahl der Anfangswerte der Strukturvariablen nur am Anfang der Rechnung bemerkbar ist. Im Laufe der Simulation geht die Erinnerung an die Anfangswerte verloren; in diesem Sinne sind die Endstadien der Simulationsrechnungen nur sehr schwach von der speziellen Wahl der Anfangswerte abhängig.

Bei der Berechnung der Opazität im PopI-Fall wird von der Feststellung ausgegangen, dass normalerweise die wichtigsten Beiträge zur Opazität von den Molekülen mit den höchsten Bindungsenergien beigesteuert werden. Deren Häufigkeiten entsprechen stets dem chemischen Gleichgewichtswert oder sind auch im Nichtgleichgewichtsfall nicht weit



davon entfernt. Abweichungen von der chemischen Gleichgewichtszusammensetzung des Gases haben deswegen im Allgemeinen bei der PopI-Gasmischung keinen starken Einfluss auf die Opazität. Deswegen werden hier Opazitäten verwendet, die für den Fall chemischen Gleichgewichts berechnet wurden.

Anders verhält es sich im primordialen Fall: Hier tragen nur die unterschiedlichen Wasserstoffspezies gemäß ihrer Häufigkeit zur Opazität bei. Die Modelle, bei denen die chemische Entwicklung ausgelassen wurde (Abschnitt 6.2), enthalten eine PopIII-Opazität, die unter der Annahme, dass sich die Gasmischung bei den vorliegenden Werten für Teilchendichte und Temperatur im chemischen Gleichgewicht befand, berechnet wurde. Diese Vorgehensweise entspricht in etwa der von Omukai & Nishi [42] und Ripamonti et al. [50] gewählten. Ein wichtiger Unterschied zur vorliegenden Arbeit besteht aber darin, dass diese Autoren andere Opazitäten, nämlich die von Lenzuni et al. [31] benutzen, die nur im Temperatur- bzw. Dichtebereich von  $1000 \leq T$  [K]  $\leq 7000$  bzw.  $10^{-12} \leq \rho$  [g cm<sup>-3</sup>]  $\leq 0,5$  definiert sind. Bei Temperaturen unter 1000 K wird die Opazität Null gesetzt, bei über 7000 K werden die Opazitäten von Rogers & Iglesias [51] benutzt. Außerdem wurde der Strahlungstransport nur für die optisch dünne Hülle in grauer Näherung berechnet, während für den optisch dicken Kern die Diffusionsnäherung benutzt wird. Das thermische Verhalten des Gases wird über Heiz- und Kühlfunktionen in der Energiegleichung modelliert, während in der vorliegenden Arbeit die Kühlung des Gases über die Kopplung zwischen Gas und Strahlungsfeld, mittels Opazität eingeht.

Das Gas befindet sich im Laufe der Entwicklung des Objekts aber nicht im chemischen Gleichgewicht, sodass dieser Ansatz nicht korrekt ist. Die notorische Schwierigkeit, H<sub>2</sub> aus der Gasphase zu bilden, führt dazu, dass die H<sub>2</sub>-Häufigkeit oft stark von der chemischen Gleichgewichtshäufigkeit abweicht. H<sub>2</sub> ist aber der wichtigste Absorber in der PopIII-Gasmischung. Die in dieser Arbeit benutzten PopIII-Opazitäten (Mayer [35]) sind im Bereich von  $10^{-16} \leq \rho$  [g cm<sup>-3</sup>]  $\leq 10^{-2}$  bzw.  $60 \leq T$  [K]  $\leq 40000$  gültig. Der Gültigkeitsbereich ist deutlich größer als bei den Tabellen von Lenzuni et al. [31]. Die Tabellen von Mayer [35] geben das Rosseland- und das Planckmittel der Massenextinktions- bzw. Massenabsorptionskoeffizienten an. Sie setzen beim Planckmittel auch kein chemisches Gleichgewicht für die Teilchendichte voraus, sondern verwenden die Teilchendichten aus der Lösung der chemischen Ratenetzwerke.

Bei den Modellen einschließlich chemischer Entwicklung wird die Opazität anhand der tatsächlich vorliegenden Häufigkeiten bestimmt, indem der Beitrag jeder einzelnen Spezies zur Opazität berechnet und diese am Ende zu einer Gesamtopazität aufsummiert werden. Hier greifen also die hydrodynamische, die chemische und die Strahlungstransportkomponente des Modells konsistent ineinander, ein wichtiger Aspekt, der die vorliegende von ähnlichen Arbeiten unterscheidet. Darüber hinaus muss keine künstliche Aufteilung zwischen dem optisch dicken Kern und der optisch dünnen Hülle durchgeführt werden.

Die folgende Diskussion der Ergebnisse lehnt sich an die Diskussion von Ripamonti et al. [50] an.

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

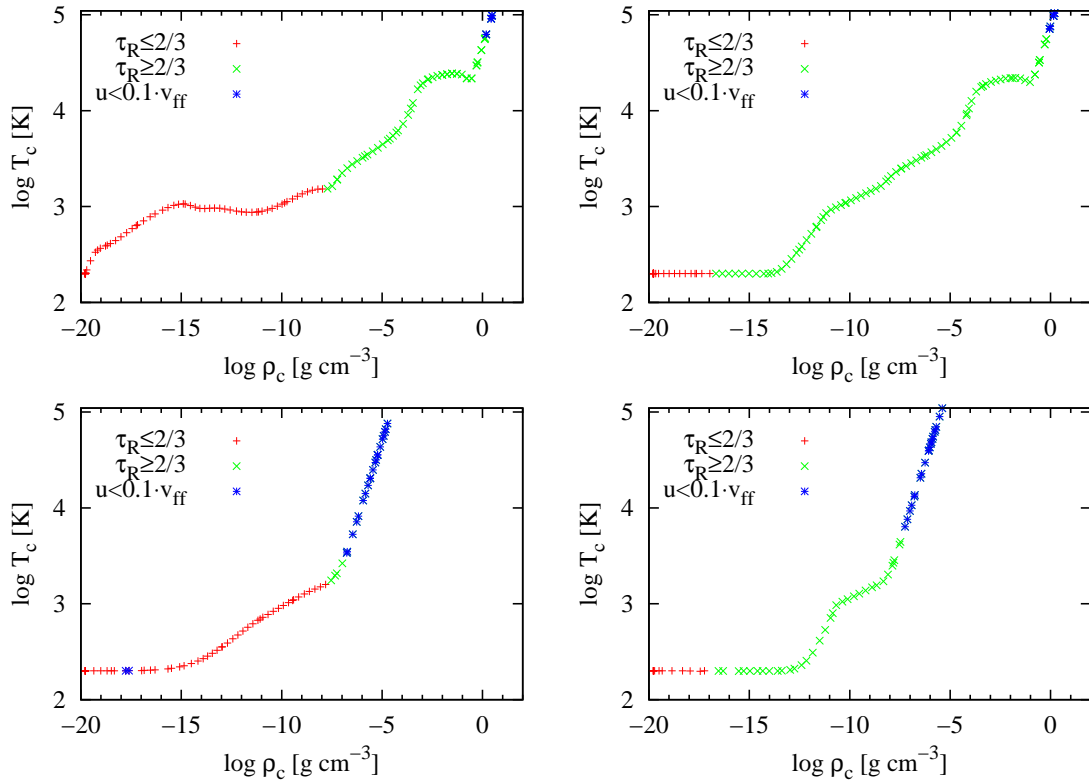


Abbildung 6.16: Entwicklung der Zentraltemperatur als Funktion der Zentraldichte für den PopIII- (links) und PopI-Fall (rechts). Oben für Modelle einschließlich chemischer Entwicklung, unten zu Vergleichszwecken für Modelle, bei denen die chemische Zusammensetzung festgehalten wurde (Abschnitt 6.2).

#### 6.3.1 Die Etappen der Sternentstehung

Es gibt einen starken Zusammenhang zwischen der chemischen Zusammensetzung des Gases und der thermischen und dynamischen Entwicklung des Objekts. Diese Tatsache hängt damit zusammen, dass bis zur Hälfte der Kompressionsenergie in chemische Energie umgewandelt werden kann (Virialsatz) und dass insbesondere im primordialen Fall die Abstrahlungseigenschaften des Gases erheblich von seiner Zusammensetzung abhängen. Wie stark sich dieser Zusammenhang auswirkt, zeigt ein Vergleich zwischen Modellen, die die chemische Entwicklung beinhalten, mit solchen, die sie auslassen.

Zunächst werden die allgemeinen Charakteristika der Entwicklung während der Kollapsphase betrachtet: Die Entwicklung verläuft in den Modellen mit Chemie so, wie sie bereits in Abschnitt 6.2 für die Modelle ohne chemische Entwicklung beschrieben wurde. Aufgrund der Änderung der chemischen Zusammensetzung sind darüber hinaus folgende Entwicklungsstufen zu beobachten:

1. Selbstähnliche Phase. Anfangs kontrahiert die Wolke, so dass sich im PopI-Fall nach einer isothermen Kontraktionsphase ein selbstähnlicher Verlauf ähnlich dem

mit  $\rho \sim r^{-\alpha}$  ( $\alpha \approx 2$ ), wie er von Larson [29] und Penston [44] gefunden wurde, bildet<sup>4</sup>. Im Temperaturbereich zwischen  $1500 \lesssim T$  [K]  $\lesssim 4500$  nimmt die PopI-Opazität aufgrund der Verdampfung des Staubes stark ab (siehe Abschnitt 6.2.1 und Abbildung 2.4), was sich auch in der Steigung des Profils in Abbildung 6.16 zeigt. Gäbe es keine chemische Entwicklung, würde die Konfiguration bis zum Erreichen der Abbruchbedingung der Rechnungen adiabatisch kontrahieren. Die Änderungen der chemischen Struktur haben für die thermische Entwicklung des Gases Folgen, die das oben beschriebene Verhalten überlagern, wie in den folgenden Punkten beschrieben werden wird.

Der primordiale Fall ohne chemische Entwicklung ist ähnlich: Das Gas kontrahiert zunächst nahezu isotherm, danach folgt eine Phase adiabatischer Kontraktion des noch immer optisch dünnen Gases, um, nach Übergang in den optisch dicken Zustand, in einer Weise zu kontrahieren, die vom PopI-Fall kaum zu unterscheiden wäre. Wird die chemische Entwicklung berücksichtigt, ändert sich die Entwicklung dramatisch: das Gas kontrahiert von Anfang an und heizt sich auf  $T_c \approx 10^3$  K auf, um anschließend beinahe isotherm zu kontrahieren: Die Bildung von  $H_2$  setzt Energie frei, die zur Aufheizung des Gases beiträgt, gleichzeitig steigt durch die erhöhte  $H_2$ -Häufigkeit die Kühlleistung des Gases. Ab  $T_c \approx 1500$  K wird mehr molekularer Wasserstoff abgebaut als gebildet wird, sodass sich die Aufheizung durch Kontraktion und  $H_2$ -Bildung und die effektivere Kühlung in etwa ausgleichen. Dadurch ergibt sich der plateauartige Verlauf in Abbildung 6.16. Sobald das Gas optisch dick geworden ist, verläuft die weitere Entwicklung wie im PopI-Fall.

2. Sobald im zentralen Bereich die Teilchendichte  $n \gtrsim 10^8 \text{ cm}^{-3}$  erreicht, wird der gesamte Wasserstoff in diesem Bereich in  $H_2$  umgewandelt, weil die Dreiteilchenprozesse einsetzen; somit steigt auch die Kühlleistung des Gases. Bei den Modellen mit PopIII-Opazität findet diese Umwandlung noch in der vergleichsweise lange andauernden optisch dünnen Phase statt, während die Modelle mit PopI-Opazität zunächst isotherm kontrahieren und erst danach, nach Erreichen eines optisch dicken Zustandes, eine wesentliche Änderung in der H- bzw.  $H_2$ -Zusammensetzung erfahren.
3.  $T \gtrsim 2000$  K:  $H_2$ -Dissoziation beginnt. Es muss Energie aufgewendet werden, um die Bindung des  $H_2$ -Moleküls aufzubrechen; diese wird von der Kompression bereitgestellt. Aus diesem Grund wirkt der Abbau molekularen Wasserstoffs wie ein Thermostat, der den Temperatur- und damit verbundenen Druckanstieg abbremsst, wodurch der Kollaps ungebremst weiterläuft<sup>5</sup>.
4.  $T \gtrsim 2400$  K: Der zentrale Bereich der Wolke geht in eine beinahe adiabatische Schichtung über (siehe  $\rho_c - T_c$ -Diagramm, Abbildung 6.16). Bis zur Kernbildung verläuft der weitere Kollaps fast adiabatisch. Bis zu diesem Entwicklungsstadium sind die Ergebnisse dieser Arbeit in guter Übereinstimmung mit denen vom

<sup>4</sup>Das Zentrum der Wolke entwickelt sich in diesen Modellen auf der kürzesten Zeitskala, weil hier die Dichte am höchsten ist; die dynamische Zeitskala ist proportional zu  $\rho^{-1/2}$ .

<sup>5</sup>Ein zu starker Anstieg des thermischen Drucks könnte den Kollaps anhalten. Dies wird aber selbst bei den Modellen ohne chemischer Entwicklung nicht beobachtet; eine ausreichende Abstrahlung der Kompressionsenergie wird unabhängig der angenommenen Opazität – PopI oder PopIII – stets gewährleistet

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

---

Ripamonti et al. [50].

5.  $T_c \approx 20 \cdot 10^3 \text{K}$ : Spätestens ab dieser Temperatur ist der molekulare Wasserstoff bis auf eine vernachlässigbare Restmenge wieder abgebaut; der Wasserstoff wird ionisiert und liegt fast ausschließlich in Form von  $\text{H}^+$  vor. Nach einer kurzen Phase der fast isothermen Kontraktion (siehe Abbildung 6.16) während der Ionisation von atomarem Wasserstoff folgt anschließend erneut eine adiabatische Phase, die bis zum Ende der Rechnung anhält. Dieser plateauartige Verlauf wird in den Modellen ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung nicht beobachtet: Die Ionisation von atomarem Wasserstoff entzieht dem Gas genauso wie die Dissoziation von  $\text{H}_2$  Energie, d.h. es wird auch hier Kompressionsenergie in chemische Energie umgewandelt. Auch hier handelt es sich um eine Art Thermostat. Dieser Effekt ist metallizitätsunabhängig, weil allein der Wasserstoff daran beteiligt ist und daher allein eine Folge der chemischen Entwicklung (siehe Abbildung 6.16). Bis zu einer Zentraltemperatur von  $T_c \lesssim 15 \cdot 10^3 \text{K}$  entsprechen die chemischen Häufigkeiten denen von Ripamonti et al. berechneten; das durch die H-Ionisation verursachte Plateau bei  $T_c \approx 20 \cdot 10^3 \text{K}$  ist in der vorliegenden Arbeit deutlicher ausgeprägt. Bei höheren Temperaturen liegt der Wasserstoff fast nur noch in ionisierter Form vor. Die  $\text{H}_2$ -Häufigkeit nimmt nicht wieder zu.
6. Die Kontraktionsgeschwindigkeit im Bereich des Kerns liegt deutlich unter der Freifallgeschwindigkeit. Das Material, das über dem Kernbereich auf diesen herabregnet, fällt weiterhin mit hoher Geschwindigkeit, so dass sich ein Stoß bildet. Der Stoß grenzt den zentralen, ionisierten Bereich der Wolke von der molekularen Hülle ab. Die Materie fällt sowohl im PopI- sowie im PopIII-Fall mit nahezu dreifacher Schallgeschwindigkeit auf den Kern (siehe Abbildung 6.17 oben); dieser Wert liegt im Bereich dessen, was man beim Kollaps einer Bonnor-Ebert-Kugel erwarten würde (Larson [29], Penston [44]). Es handelt sich aber nicht um freien Fall; die Maximalgeschwindigkeit beträgt ca. 70% der Freifallgeschwindigkeit (siehe Abbildung 6.17 unten).

#### 6.3.2 Struktur des Objekts am Ende der Rechnung

Was die chemische Zusammensetzung angeht, finden sich beim Erreichen der Abbruchbedingung (Zentraltemperatur  $T_c \gtrsim 10^5 \text{K}$ ) für die Simulation drei klar strukturierte Bereiche (Abbildung 6.18):

1. Im Zentrum der heiße, aus ionisiertem Wasserstoff bestehende Kern, dessen Masse am Ende der Rechnung bei ca.  $0,1 M_\odot$  liegt. Durch fortgesetzte Akkretion wird er Kern noch weiter wachsen. Der hydrostatische Kern nach Definitionsgleichung (6.5) entsteht bei Modellen ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung deutlich früher als bei den in diesem Abschnitt vorgestellten Modellen. Entgegen den Ergebnissen von Omukai & Nishi [42] hat die vorliegende Arbeit in

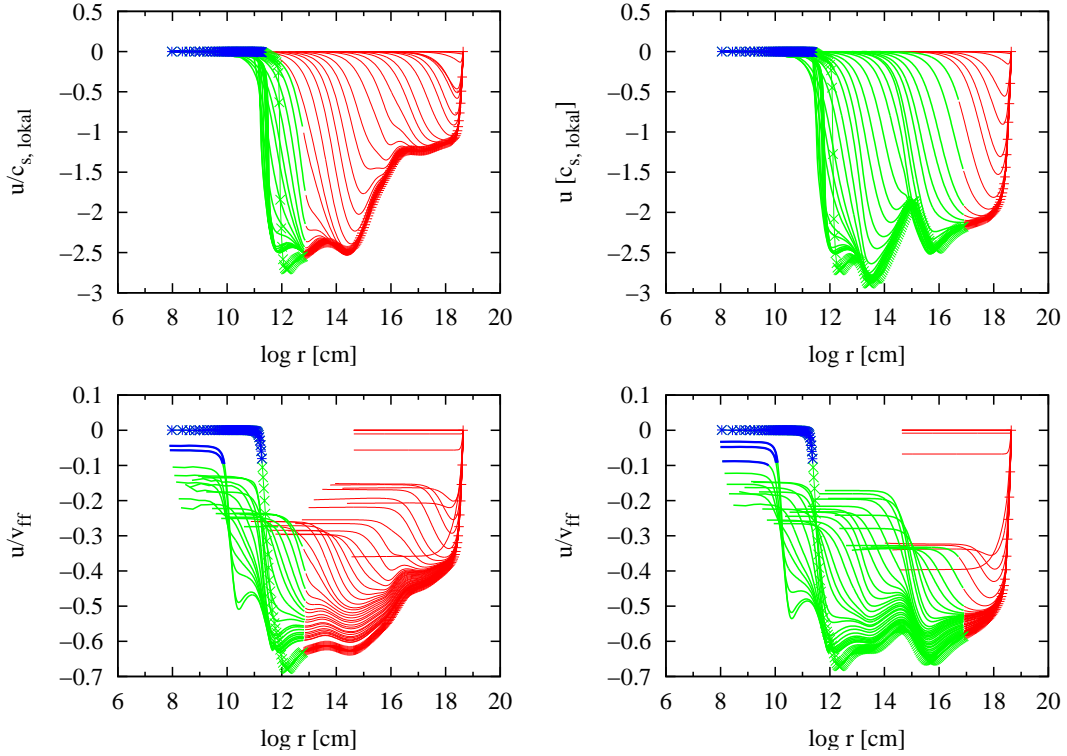


Abbildung 6.17: Vergleich der Einfallsgeschwindigkeiten von PopIII- (links) und PopI-Modellen (rechts). Die oberen Abbildungen zeigen die auf die lokale Schallgeschwindigkeit normierte Einfallsgeschwindigkeiten, unten ist die Einfallsgeschwindigkeiten in Einheiten der Freifallgeschwindigkeit abgebildet. Diese sind in den Modellen mit PopIII- und PopI-Opazität weitgehend identisch. Wie in den anderen Abbildungen auch, ist hier der hydrostatische Kern blau, der optisch dicke Bereich außerhalb des Kerns grün und der optisch dünne Bereiche rot dargestellt.

Übereinstimmung mit der von Ripamonti et al. [50] ergeben, dass der  $H_2$ -Anteil im Zentrum nicht wieder ansteigt. Ripamonti et al. beobachten eine dünne Übergangsregion atomaren Wasserstoffs zwischen Kern und molekularer Hülle, bei der es sich vermutlich um einen numerischen Effekt, der durch die Ausschmierung des Stoßes (künstliche Viskosität) hervorgerufen wird, handelt. In der vorliegenden Arbeit wird diese H-Übergangsregion nicht beobachtet.

2. Der Kern wird von einer molekularen Hülle, deren Masse einige Sonnenmassen beträgt, umgeben, die sich im Wesentlichen im freien Fall auf den Kern befindet ( $u/v_{ff} \approx 0,7$  an der Stoßseite, abnehmend auf  $u/v_{ff} \approx 0,3$  an der äußeren Seite, siehe Abbildung 6.18). Ihre Masse wird in den Rechnungen von Ripamonti [50] auf ca.  $3 M_{\odot}$  abgeschätzt, in der vorliegenden Arbeit ergab sich ein ähnlicher, leicht höherer Wert, der mit der etwas größeren Ausdehnung der Hülle ( $r \approx 5 \cdot 10^{15}$  cm) zusammenhängt.
3. Die molekulare Hülle ist ihrerseits in eine äußere, atomare Region eingebettet, die einen Großteil der Masse ausmacht. Im PopIII-Fall steigt ihre Temperatur im Übergangsbereich zwischen atomaren und molekularen Gas auf etwas über  $10^3$  K an, während im PopI-Fall die Temperatur den Anfangswert praktisch beibehält

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

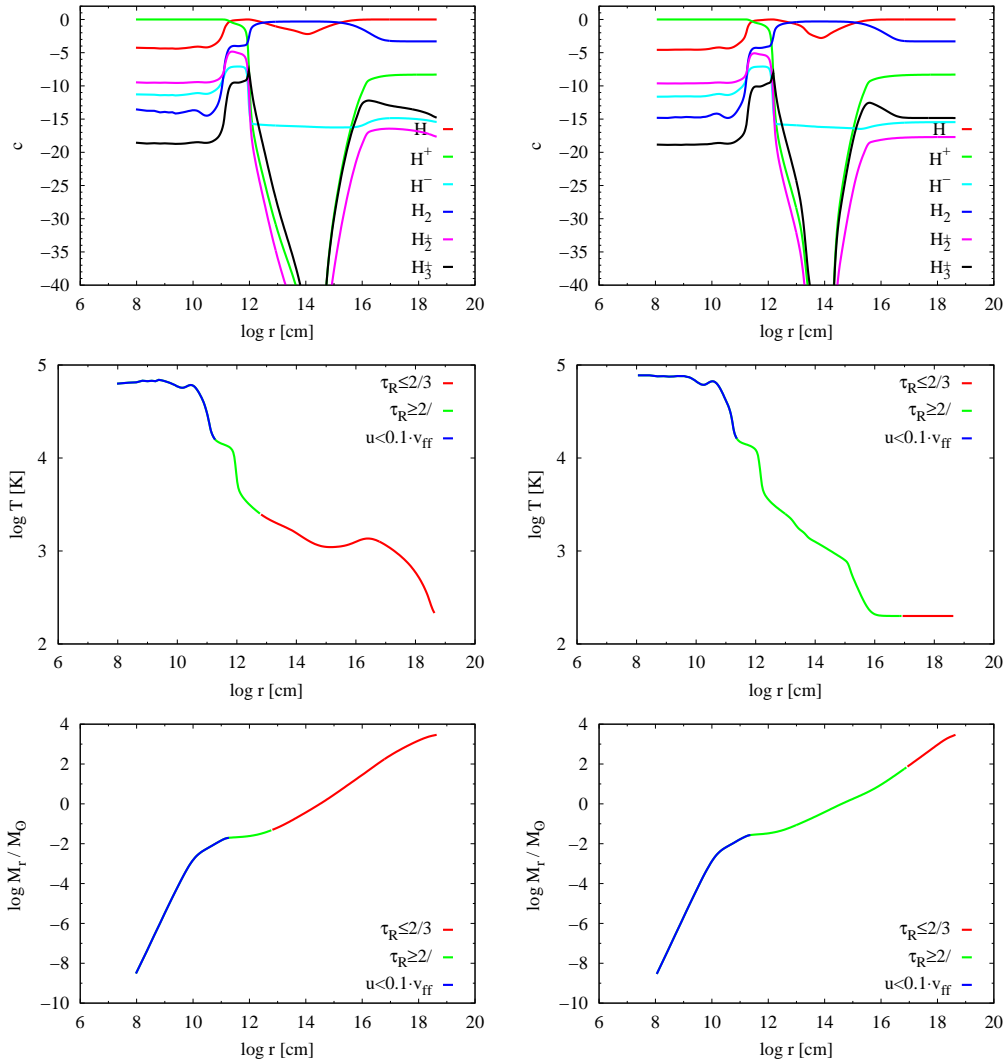


Abbildung 6.18: Endzustand der Modellrechnungen ( $T_{\text{init}} = 200 \text{ K}$ ,  $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ). Abgebildet sind oben die Konzentrationen der chemischen Wasserstoffspezies in Abhängigkeit des Radius für die PopIII- (links) und PopI-Modelle (rechts), in der Mitte die Temperatur, unten die Masse innerhalb des Radius  $M_r$  in Sonnenmassen. Der Wertebereich der Konzentrationen wurde in der Abbildung auf  $10^{-40}$  nach unten begrenzt. Der hydrostatische Kern, der in etwa mit dem heißen, ionisierten Bereich zusammenfällt, ist in beiden Fällen von ähnlicher Ausdehnung, ebenso wie die molekulare Hülle. Diese fällt im PopI-Fall mit dem optisch dicken Bereich außerhalb des Kerns zusammen, während sie im PopIII-Fall optisch dünn ist. Auch die den PopIII-Protostern ( $\tau_R = 2/3$ ) umgebende Hülle besteht teilweise aus molekularem Wasserstoff.

(siehe Abbildung 6.18); die Teilchendichte nimmt in keinem Modell stark genug zu, um eine wesentliche Änderung der chemischen Zusammensetzung zu bewirken, insbesondere wird der Wert, ab dem Dreiteilchenreaktionen zur Bildung von  $\text{H}_2$  einsetzen würden, nie erreicht.

Welchen Einfluss der Absorptionskoeffizient bzw. die Anfangsbedingungen auf die Entwicklung der Wolke haben wird in den nächsten beiden Abschnitten diskutiert.

### 6.3.3 Zeitliche Entwicklung der Modelle

Dieser Abschnitt ist das Gegenstück zum Abschnitt 6.2.1; es werden die Ergebnisse von Simulationsrechnungen mit unterschiedlichem Absorptionskoeffizienten gezeigt und zwar für

1. die PopI-Gasmischung ( $\kappa_{\text{PopI}}$ ) in der analytischen Näherung nach Gleichung (2.14),
2. die PopIII-Gasmischung ( $\kappa_{\text{PopIII}}$ ) unter Verwendung der tabellierten Werte nach Mayer [35], wobei die aktuelle chemische Zusammensetzung bei der Bestimmung des Planckmittels der Opazität  $\kappa_{\text{P}}$  berücksichtigt wird. Das Rosselandmittel der Opazität  $\kappa_{\text{R}}$  wird aus tabellierten Werten interpoliert, wobei die Annahme eingeht, dass sich das Gas für den gegebenen  $\rho$ - $T$ -Wert im chemischen Gleichgewicht befindet.

Die Entwicklung der Modelle im Fall der PopI-Metallizität ist in den Abbildungen 6.19 bis 6.22, dargestellt, im Fall der PopIII-Metallizität in den Abbildungen 6.23 bis 6.25.

Die zeitliche Entwicklung der Strukturgrößen Dichte  $\rho$ , radiale Geschwindigkeit  $u$ , Temperatur  $T$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$  sind für den PopI-Fall in der Abbildung 6.19 und für den PopIII-Fall in der Abbildung 6.23 dargestellt; sie entsprechen den Abbildungen 6.4 und 6.7 aus Abschnitt 6.2.1.

Simulationsrechnungen wie die von Larson [29] haben ergeben, dass sich während der Entwicklung von PopI-Protosternen zunächst ein erster molekularer Kern bildet. Die Dissoziation von  $\text{H}_2$  führt später in der Entwicklung zur Entstehung eines zweiten ionisierten Kerns, der den ersten verzehrt. Im primordialen Fall wird von Ripamonti et al. [50] nur ein Kern, der dem zweiten Kern im PopI-Fall entsprechen würde, gefunden. In der vorliegenden Arbeit wurden Modellrechnungen für den primordialen und für den heutigen Fall durchgeführt. In beiden Fällen deutet sich die Bildung eines ersten Kerns an, der später in den hydrostatischen Kern übergeht an (siehe Abbildungen 6.19 bzw. 6.23 bei  $r \approx 10^{12}$  cm bzw.  $r \approx 10^{10}$  cm). Das Fehlen eines ersten Kerns bei Ripamonti et al. ist vermutlich auf die Art und Weise, in der bei Ripamonti et al. Strukturen durch die künstliche Viskosität ausgeschmiert werden, oder auf eine geringere Auflösung als in der vorliegenden Arbeit zurückzuführen.

Die Protosterne bzw. die hydrostatischen Kerne haben bei ihrer Entstehung, d.h. wenn nach Bildung der Stoßfront die Einfallgeschwindigkeit erstmals unterhalb von einem Zehntel der Freifallgeschwindigkeit liegt (Gleichung 6.5), eine verhältnismäßig kleine Masse von  $M_{\text{Kern}} \lesssim 10^{-9} M_{\odot}$ , die dann bis zum Ende der Simulationsrechnung durch Akkretion auf  $M_{\text{Kern}} \approx 0,1 M_{\odot}$  anwächst. Die Akkretionsraten werden in Abschnitt 6.3.4 näher betrachtet.

Für einen PopI-Stern kann zwischen äußerer Staubhülle, Protostern und hydrostatischem Kern unterschieden werden (siehe Abschnitt 6.2.1). Die Staubhülle besteht aus Staub, der in der einfallenden Materie enthalten ist. In dieser Hülle steigt die Temperatur wegen der großen Staubopazität rasch an (siehe Abbildung 6.19 rechts oben). Der Staub verdampft ab einer Temperatur von ca. 1300 K. Dies ist in dem Opazitätsmodell für die PopI-Gasmischung berücksichtigt und hat eine Abnahme der Opazität

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

---

um etwa zwei Dekaden zur Folge. In dem Temperaturbereich bis zu  $T \approx 4500$  K, ab der die Opazität wieder stark ansteigt ( $H^-$ -Absorption), ist die Opazität auch im Fall der PopI-Metallizität sehr klein (es gibt hier nur Linienabsorption durch Moleküle). In diesem Bereich ist der Temperaturverlauf viel flacher als in der Staubhülle (siehe Abbildung 6.19 rechts oben). Aufgrund der großen Staubopazität wird die optische Tiefe von  $\tau_R = 2/3$  bereits sehr weit außen erreicht (siehe Abbildung 6.20 links unten). Die Effektivtemperatur dieser äußeren Pseudoatmosphäre<sup>6</sup> ist sehr niedrig. Dies alles ist völlig analog zum Fall der Modelle ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung. Abbildung 6.20 rechts oben zeigt die Entwicklung der Leuchtkraft dieser Pseudoatmosphäre und links oben ihre Entwicklung im HR-Diagramm. Der entstehende Stern erschiene einem äußerem Beobachter nur als Fern-Infrarot-Quelle. Die Zeit wird ab dem Moment gezählt, ab dem die optische Tiefe dieses Bereichs erstmals den Wert  $\tau_R = 2/3$  erreicht; bis dahin ist seit Beginn der Simulation etwa eine freie Fallzeit vergangen, während der das Objekt langsam kontrahiert hat und optisch dicker geworden ist. Die Masseneinfallrate durch die Oberfläche der Pseudoatmosphäre ist in Abbildung 6.20 rechts unten zu sehen.

Diese Struktur gibt es im primordialen Fall nicht, weil noch kein interstellarer Staub existiert.

Der Protostern ist als der Bereich innerhalb des Radius, an dem die von der Innenseite der Staubhülle aus gemessene optische Tiefe erstmals wieder den Wert  $\tau_R = 2/3$  erreicht, definiert. Dieser Protostern entsteht erst ganz kurz vor der Entstehung des eigentlichen Kerns des Sterns. Deswegen umfasst die Zeitskala in Abbildung 6.21 nur wenige Jahre. Dieser Radius markiert sich in Abbildung 6.19 rechts oben durch einen raschen Temperaturanstieg oberhalb von  $T > 4500$  K. Die zeitliche Entwicklung des Radius dieser zweiten, inneren Pseudoatmosphäre ist in Abbildung 6.21 links unten, die der Leuchtkraft rechts oben dargestellt. Links oben zeigt diese Abbildung die Entwicklung dieses Teils des kollabierenden Objekts im HR-Diagramm: Der Protostern beginnt ebenfalls als kühles Objekt von wenigen hundert Kelvin Effektivtemperatur, die aber bis zum Zeitpunkt des Abbruchs der Rechnung sehr schnell auf 2000 K ansteigt. Der Stern leuchtet praktisch instantan am Ende der ca.  $17 \cdot 10^3$  Jahre andauernden Kollapsphase auf, wie auch die Entwicklung der Leuchtkraft in Abbildung 6.20 zeigt (zu sehen an der fast vertikalen Linie am Ende der Entwicklung).

Im Fall der primordialen Metallizität bleibt der ganze äußere Bereich optisch dünn. Wenn nach etwa einer freien Fallzeit die optische Dicke erstmals den Wert  $\tau_R = 2/3$  erreicht, entsteht sehr bald der Protostern mit einer Pseudoatmosphäre im Bereich der raschen Opazitätzunahme durch  $H^-$ -Absorption bei Temperaturen  $T \gtrsim 4500$  K (siehe Abbildung 6.19 rechts oben). Die weitere Entwicklung dieses Protosterns ab diesem Zeitpunkt erfolgt außerordentlich rasch innerhalb von ca. vier Jahren. Die Entwicklung ist in Abbildung 6.24 dargestellt. Sie entspricht weitgehend der Entwicklung im Fall der PopI-Sterne (Abbildung 6.21), da die Opazität im Temperaturbereich  $T \gtrsim 8000$  K

---

<sup>6</sup>Dies ist keine Atmosphäre im üblichen Sinn, die einen Stern von seiner Umgebung abgrenzt. Als Pseudoatmosphäre wird bei Sternwinden oder Akkretion die Schicht bezeichnet, aus der im Mittel die emittierte Strahlung stammt, d.h. bei der von außen aus gesehen erstmals der Wert  $\tau = 2/3$  erreicht wird.



praktisch allein durch H und He bestimmt wird<sup>7</sup>.

Die zeitliche Entwicklung der Konzentrationen der chemischen Spezies dieser Modelle ist in den Abbildungen 6.22 für PopI-Metallizität und 6.25 für PopIII-Metallizität dargestellt. Es stellt sich heraus, dass die Entwicklung der Konzentrationen der verschiedenen Spezies weitgehend unabhängig von der Metallizität ist:

Im äußeren Bereich werden beim Einfall die Wasserstoffatome durch Dreiteilchenreaktionen in  $\text{H}_2$  umgewandelt, sobald die kritische Teilchendichte von  $10^8 \text{ cm}^{-3}$  erreicht wird. Die Reaktionsrate dieser Reaktionen hängt nur schwach von der Temperatur ab, sodass die resultierende  $\text{H}_2$ -Konzentration im Bereich von  $r > 10^{12} \text{ cm}$  für die PopIII- und PopI-Gasmischung fast gleich ausfällt. Sobald die Temperatur über 2500 K steigt, beginnt der molekulare Wasserstoff zu dissoziieren und ab  $T \approx 10^4 \text{ K}$  der atomare Wasserstoff zu ionisieren.

Die Ionen  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}_2^+$  und  $\text{H}_3^+$  werden im einfallenden Material bei ca.  $r \approx 10^{14} \text{ cm}$  durch Rekombination zunächst eliminiert. Erst wenn die Temperatur im Bereich innerhalb von  $r \approx 10^{12} \text{ cm}$  auf einige  $10^3 \text{ K}$  angestiegen ist, werden diese Ionen erneut gebildet. Sie werden bei noch höheren Temperaturen aber wieder abgebaut, da ab  $T \gtrsim 20 \cdot 10^3 \text{ K}$  aller Wasserstoff in  $\text{H}^+$  übergeht.

Das für die Opazität im Temperaturbereich um  $T \approx 10^4 \text{ K}$  so wichtige  $\text{H}^-$  wird im einfallenden Material im Fall der PopIII-Gasmischung hauptsächlich mit Elektronen aus der Stoßionisation von H gebildet und dominiert die Opazität im Temperaturbereich  $4500 \lesssim T[\text{K}] \lesssim 20 \cdot 10^3$  (siehe Abbildungen 2.4, 2.3 und 2.3). Es wird bei höheren Temperaturen dann durch Photoprozesse eliminiert. Die Entwicklung der  $\text{H}^-$ -Häufigkeit ist bei PopIII- und PopI-Opazität in den Modellen sehr ähnlich, sodass auch die Opazität in beiden Fällen im Temperaturbereich, in dem  $\text{H}^-$  eine ähnliche Häufigkeit hat, fast gleich ist. Bei PopI-Metallizität würden die für die  $\text{H}^-$ -Bildung erforderlichen Elektronen durch die Ionisation von leicht ionisierbaren Metallen (vor allem Na, K, Mg, Fe) geliefert, die hier bei der Chemie nicht berücksichtigt sind. Würden diese Elektronenlieferanten berücksichtigt, ergäben sich leichte Veränderungen der  $\text{H}^-$ -Häufigkeiten bei PopI im Temperaturbereich  $4500 \lesssim T[\text{K}] \lesssim 8000$ .

Testrechnungen mit einem verkleinerten chemischen Netzwerk wie dem von Omukai & Nishi [42] respektive Ripamonti et al. [50] ergaben, dass die Vernachlässigung von  $\text{H}_2^+$  und  $\text{H}_3^+$  keine größeren Veränderungen in der Häufigkeit der für die Opazität wichtigen Spezies  $\text{H}^-$  und  $\text{H}_2$  zur Folge haben.

---

<sup>7</sup>Im Temperaturbereich  $4500 \lesssim T[\text{K}] \lesssim 8000$  hängt die  $\text{H}^-$ -Opazität leicht von der Metallizität ab, da die Elektronen in diesem Temperaturbereich von Metallen, falls welche vorhanden sind, und nicht von Wasserstoff geliefert werden.

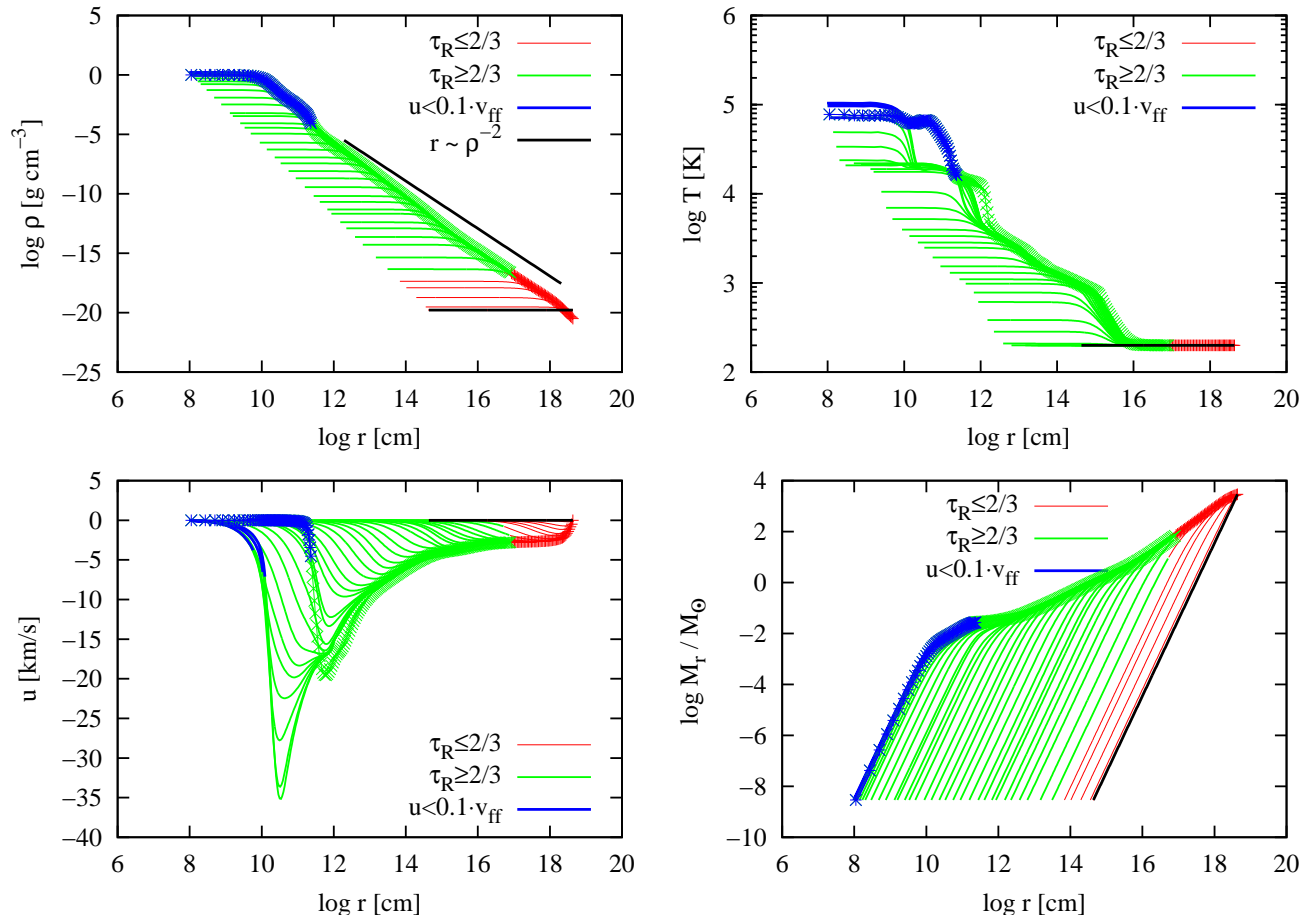


Abbildung 6.19: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Aufgetragen sind von oben links nach unten rechts jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate  $r$  der Wolke die Entwicklung der Dichte  $\rho$ , Temperatur  $T$ , Radialgeschwindigkeit  $u$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ . Das Anfangsmodell (homogene, ruhende Wolke) ist mit einer schwarzen Linie dargestellt, beim letzten Modell wurde die Lage der Gitterpunkte durch Kreuze gekennzeichnet. Das Dichteprofil verläuft nahezu mit  $\rho \sim r^{-2}$ , wie anhand der Hilfslinie in der Abbildung links oben zu erkennen ist.

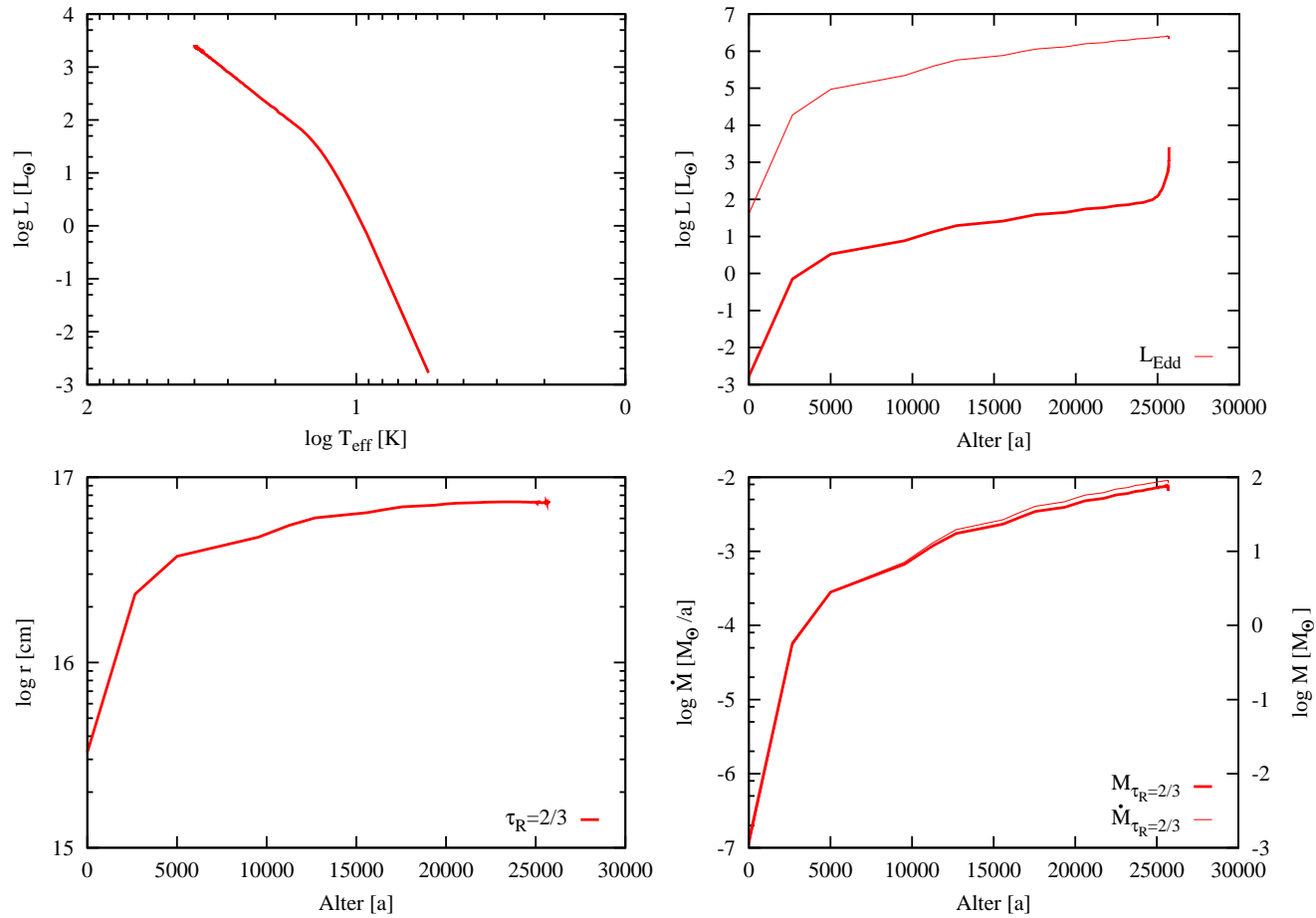


Abbildung 6.20: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Entwicklung der Staubhülle. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters der Staubhülle in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius der äußeren Staubhülle des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate der Staubhülle in Abhängigkeit von der Zeit.

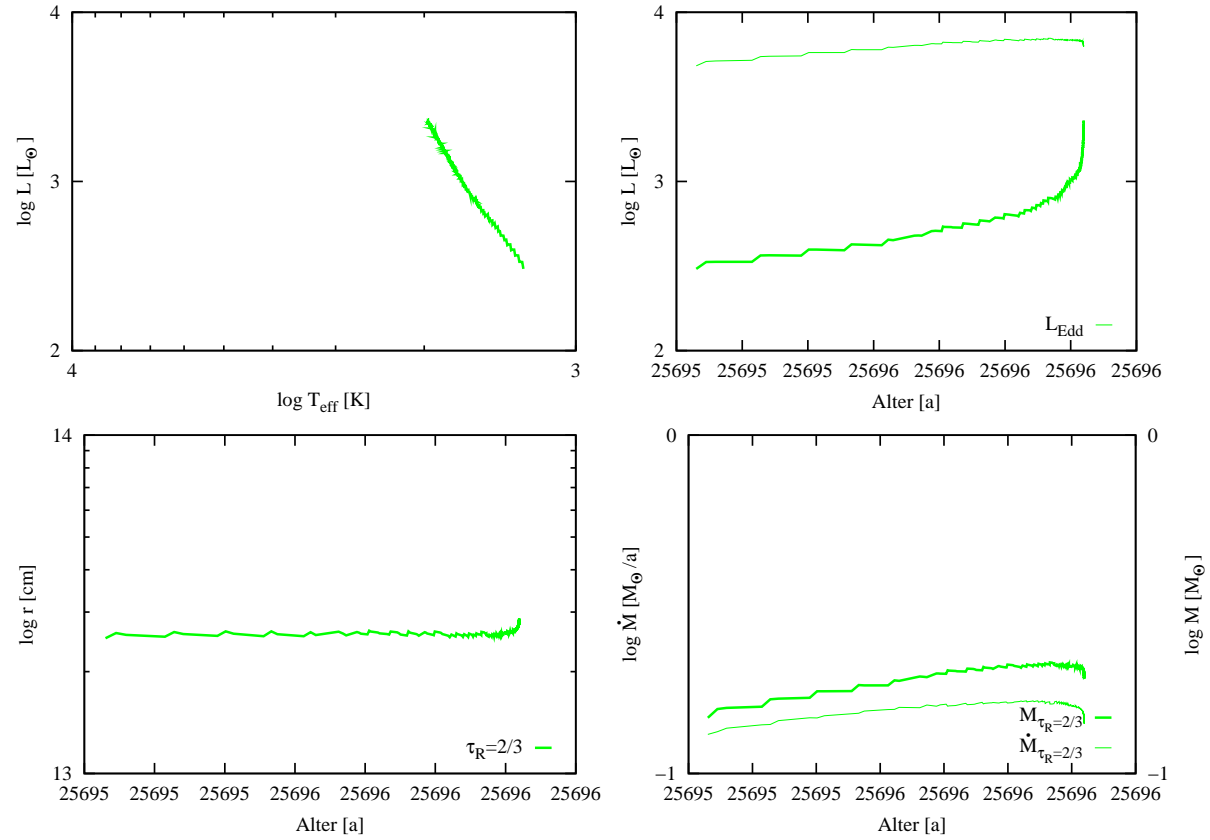


Abbildung 6.21: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Entwicklung des Protosterns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters der Staubhülle in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate der Staubhülle in Abhängigkeit von der Zeit.

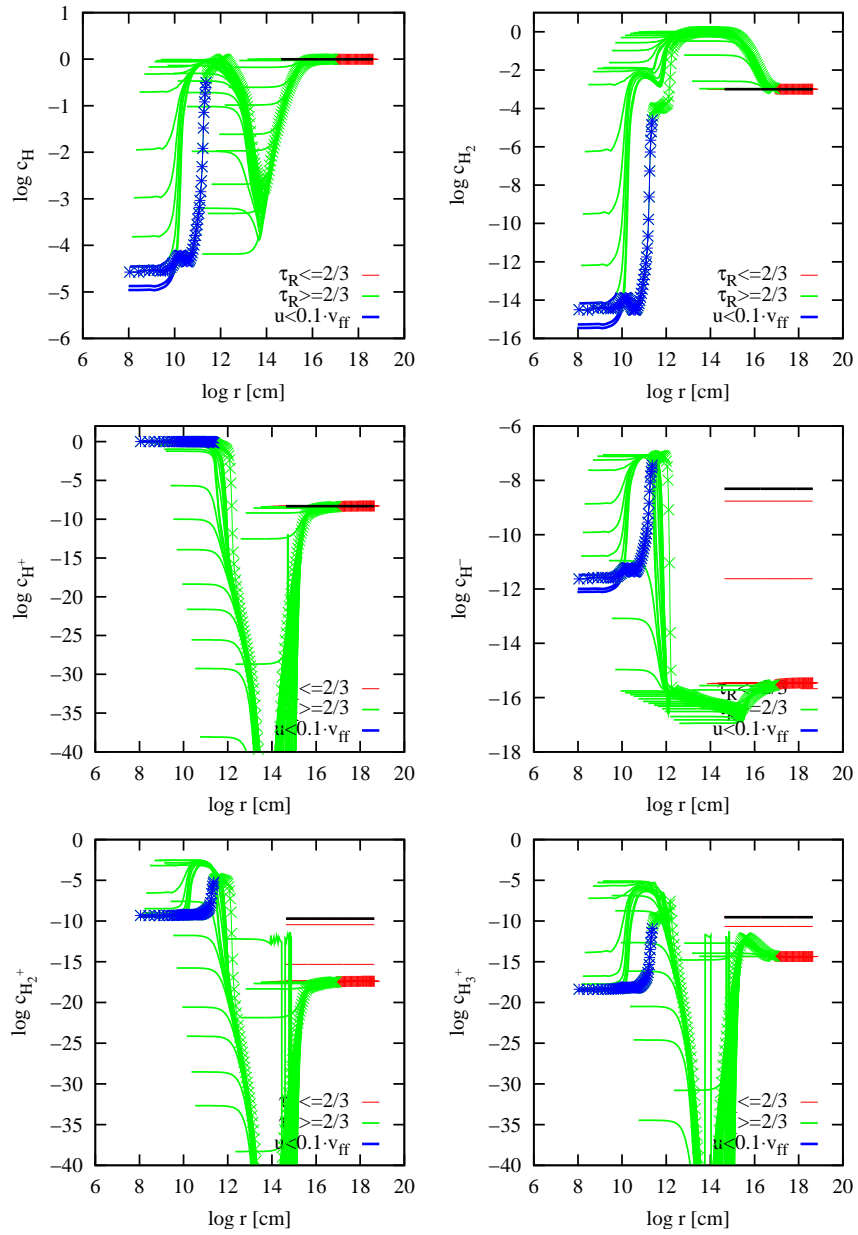


Abbildung 6.22: Modellrechnung mit PopI-Opazität. Zeitliche Entwicklung der Wasserstoffspezies. Aufgetragen sind jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate die Konzentrationen bzgl. der Wasserstoffkerne von  $\text{H}$ ,  $\text{H}_2$  (obere Zeile)  $\text{H}^+$ ,  $\text{H}^-$  (mittlere Zeile)  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{H}_3^+$  (untere Zeile).

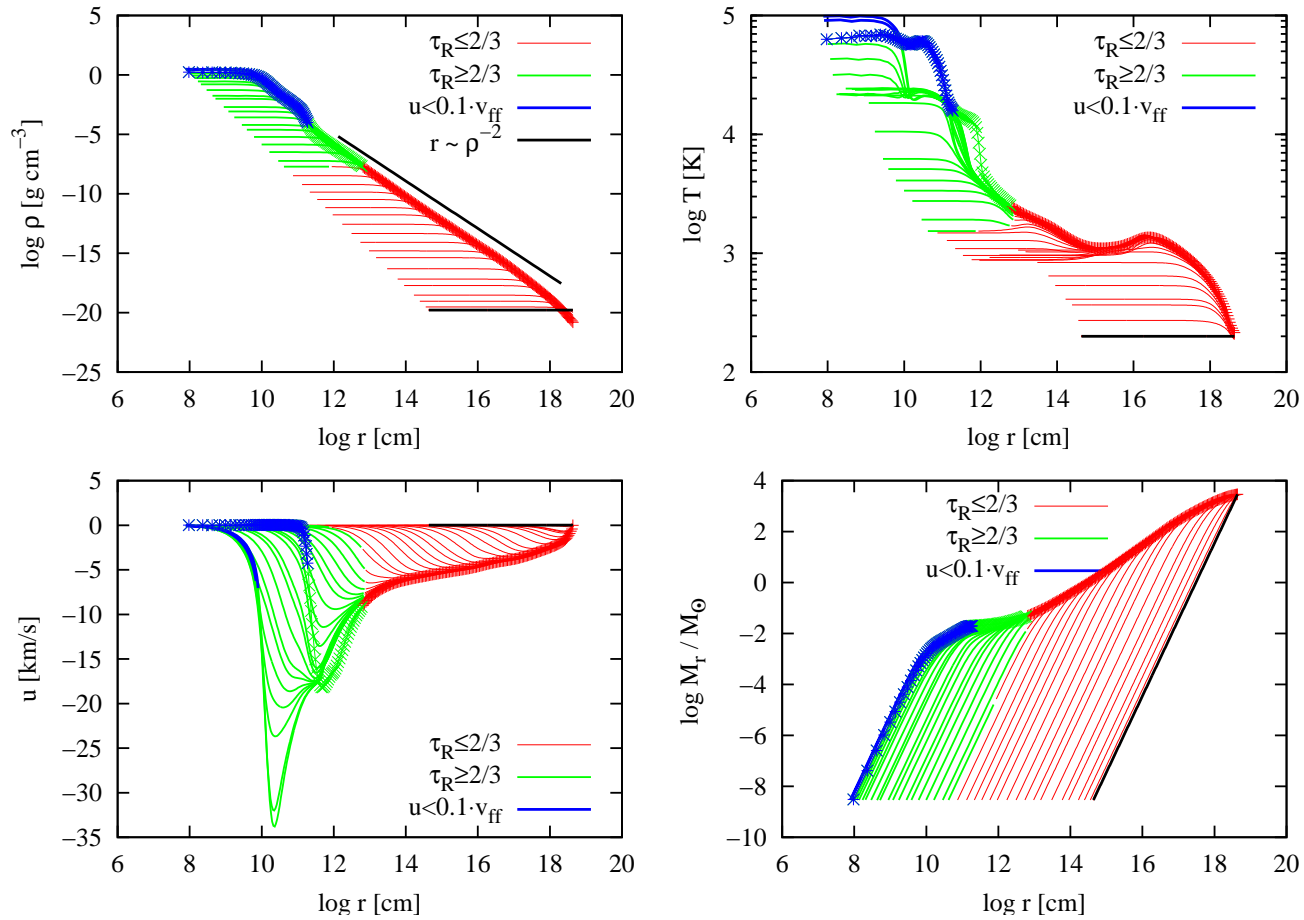


Abbildung 6.23: Modellrechnung mit PopIII-Opazität. Aufgetragen sind von oben links nach unten rechts jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate  $r$  der Wolke die Entwicklung der Dichte  $\rho$ , Temperatur  $T$ , Radialgeschwindigkeit  $u$  und Masse  $M_r$  innerhalb des Radius  $r$ . Das Anfangsmodell (homogene, ruhende Wolke) ist mit einer schwarzen Linie dargestellt, beim letzten Modell wurde die Lage der Gitterpunkte durch Kreuze gekennzeichnet. In diesem Fall ist die Abweichung vom  $\rho \sim r^{-2}$ -Verlauf des Dichteprofiles am ausgeprägtesten, wie anhand der Hilfslinie in der Abbildung links oben zu erkennen ist.

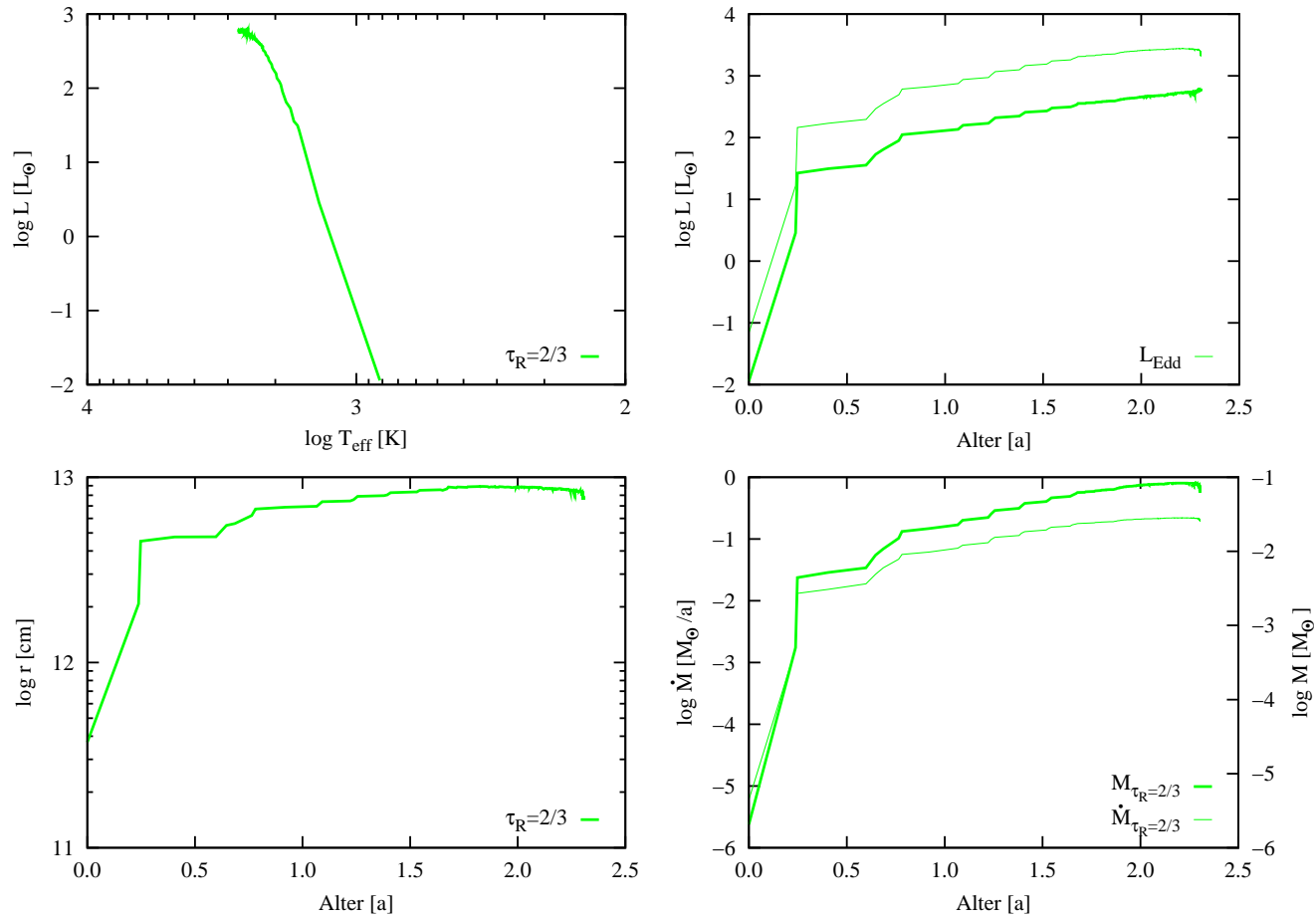


Abbildung 6.24: Modellrechnung mit PopIII-Opazität. Entwicklung des Protosterns. Obere Zeile: Hertzsprung-Russell-Diagramm (links), Leuchtkraft und Eddingtonleuchtkraft in Abhängigkeit von der Zeit, d.h. des Alters der Staubhülle in Jahren (rechts). Untere Zeile: Entwicklung des Radius des Protosterns (links), Masse und Massenakkretionsrate des Protosterns in Abhängigkeit von der Zeit.

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

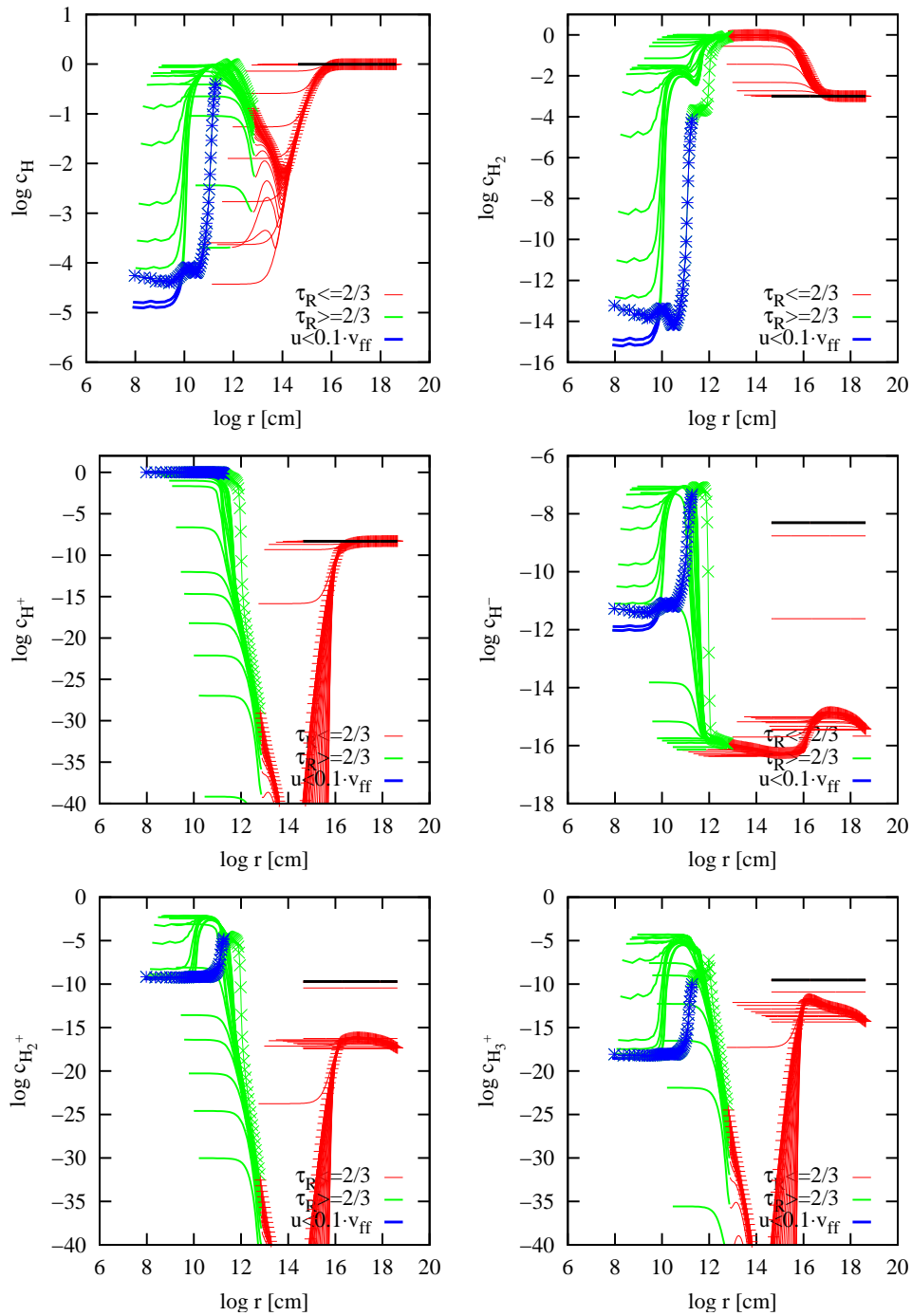


Abbildung 6.25: Modellrechnung mit PopIII-Opazität. Zeitliche Entwicklung der Wasserstoffspezies. Aufgetragen sind jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate die Konzentrationen bzgl. der Wasserstoffkerne von H, H<sub>2</sub> (obere Zeile) H<sup>+</sup>, H<sup>-</sup> (mittlere Zeile) H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>3</sub><sup>+</sup> (untere Zeile).



### 6.3.4 Massenakkretion

Als Geburtsstunde eines Protosterns kann das erstmalige Erreichen von  $\tau_R = 2/3$  gesehen werden (Abschnitt 6), weil hier erstmals ein thermisch abgeschlossenes Gebilde vorliegt, das u.a. über eine Oberfläche, dem Photosphärenradius (Gleichung 6.1), verfügt, die das Objekt von seiner Umgebung abgrenzt und über die Gas aus der Hülle auf den Protostern herabregnen kann.

Metallhaltiges Gas hat eine erheblich höhere Opazität als primordiales, sodass es in der Gesamtentwicklung des Objekts die optische Tiefe von  $\tau_R = 2/3$  in einem früheren Entwicklungsstadium als im primordialen Fall erreicht. Dies erklärt auch, wieso im PopI-Fall einige Jahrtausende zwischen dem erstmaligen Erreichen von  $\tau_R = 2/3$  und der Bildung des hydrostatischen Kerns vergehen, während es im primordialen Fall nur wenige Jahre sind, denn das primordiale Gas muss vergleichsweise stärker komprimiert werden, bevor es optisch dick wird ( $\rho_{c,\text{PopI}} \approx 10^{-17} \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\rho_{c,\text{PopIII}} \approx 10^{-8} \text{ g cm}^{-3}$ , siehe beispielsweise Abbildung 6.16). Dementsprechend unterscheiden sich die Zeitskalen der weiteren Entwicklung:

$$t_{\text{ff}} = \sqrt{\frac{3\pi}{32G\rho}} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{r^3}{2Gm}} \approx \begin{cases} 22000 \text{ a für den PopI-Fall} \\ 0,7 \text{ a für den PopIII-Fall.} \end{cases}$$

Die Akkretionszeitskala, definiert als die Zeit, die ein Massenelement  $m$  braucht, um sich von der den Protostern umgebenden Hülle auf den Kern abzusetzen, unterscheidet von der freien Fallzeit sich nur um den Faktor  $\pi/2$ , beide sind also von gleicher Größenordnung:

$$t_{\text{acc}} \approx \frac{r}{v_{\text{ff}}} = \sqrt{\frac{r^3}{2Gm}}.$$

Die Abschätzung einer *mittleren* Akkretionsrate, wie in Ripamonti et al. [50], bei der die Masse des Kerns durch das Gesamtalter des Objekts dividiert wird, führt zu einer etwa  $10^3$ -fach höheren Akkretionsrate im primordialen gegenüber dem heutigen Fall; dies liegt aber ausschließlich an der Definition des Beginns der Zeitmessung. Die Simulationsrechnungen der vorliegenden Arbeit haben ergeben, dass die Massenakkretionsrate  $\dot{M}$ , d.h. der Massenfluss  $\rho u$  über eine an der Stelle  $r$  definierten Kugeloberfläche

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho u, \tag{6.7}$$

über die gesamte Entwicklung des Objekts betrachtet, nur schwach von der Metallizität abhängt. Der Grund hierfür ist, dass die metallizitätsbedingten Unterschiede sich vor allem in Bereichen geringer Dichte und geringer Temperatur auswirken<sup>8</sup>, sodass sie mit fortschreitender Entwicklung im zentralen Bereich des Objekts immer stärker verwischen.

In den Modellrechnungen verhalten sich die simulierten Konfigurationen im wesentlichen wie Bonnor-Ebert-Kugeln:

---

<sup>8</sup>So ist beispielsweise die Temperatur des primordialen Objekts im äußeren, optisch dünnen Bereich höher als im Fall mit PopI-Metallizität, wo die Temperatur über die gesamte Rechnung beinahe konstant bleibt (siehe Abbildungen 6.23 und 6.19 jeweils rechts oben.)

### 6.3. MODELLRECHNUNGEN EINSCHLIESSLICH CHEMISCHER ENTWICKLUNG

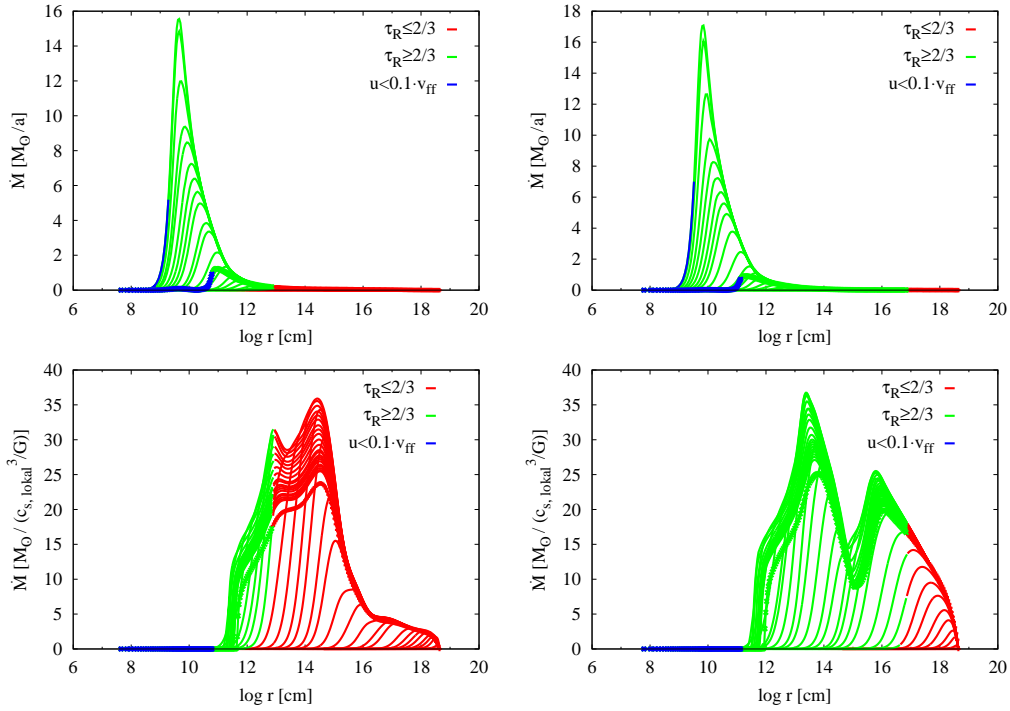


Abbildung 6.26: Modellrechnungen für den PopIII-Fall (links) und den PopI-Fall (rechts). Aufgetragen ist die Massenakkretion ( $\dot{M} = 4\pi r^2 \rho u$ ) in  $M_\odot/a$  (oben) bzw.  $c_{s, \text{lokal}}^3/G$  (unten) über den Radius  $r$  für die Gesamtsimulationsrechnung.

- Der Kollaps verläuft von außen nach innen.
- Das Dichteprofil verläuft mit  $\rho \sim r^{-\alpha}$  ( $\alpha \gtrsim 2$ ); die Einfallgeschwindigkeit liegt betragsmäßig bei ca. 70% der Freifallgeschwindigkeit, es handelt sich also beinahe um freien Fall.
- Die Einfallgeschwindigkeit erreicht etwa das Dreifache der lokalen Schallgeschwindigkeit ( $\mathcal{M} \approx 3,3$ ).

Abbildung 6.26 zeigt die Massenakkretion ( $\dot{M} = 4\pi r^2 \rho u$ ) als Funktion des Radius des Objekts sowohl für den PopIII- wie für den PopI-Fall. Ihr Absolutwert ist an der Stelle mit der höchsten Einfallgeschwindigkeit am höchsten. Es sind allenfalls leichte quantitative Unterschiede zwischen dem primordialen und dem heutigen Fall zu auszumachen. Es gibt einen Zusammenhang zwischen der Akkretionsrate und der *lokalen* Schallgeschwindigkeit  $c_{s, \text{lokal}}$ , wonach

$$\dot{M} \sim f \frac{c_{s, \text{lokal}}^3}{G}$$

gilt (siehe z.B. Banerjee & Pudritz [5]). Wegen  $u = \mathcal{M}c_s$  sollte bei einer Überschallströmung dann  $f \sim \mathcal{M}^3$  gelten, d.h. bei einer Machzahl von  $\mathcal{M} \approx 3,3$  ergäbe sich  $f \approx 35$ . Genau dies sieht man in Abbildung 6.26 unten, wobei auffällt, dass das Maximum der

auf diese Weise normierten Akkretionsrate bei PopIII-Metallizität im optisch dünnen Bereich liegt, während es im PopI-Fall innerhalb des Protosterns liegt<sup>9</sup>. Dieser Zahlenwert unterscheidet sich deutlich von dem einer kollabierenden singulären isothermen Kugel, bei der eine Massenakkretionsrate von etwa  $0,96 \text{ c}^3/\text{G}$  zu erwarten wäre (siehe z.B. Banerjee & Pudritz [5]).

Die Massenakkretionsraten auf den Protostern bzw. den hydrostatischen Kern lassen sich mit Gleichung (6.7) an der Stelle  $r_\tau$  bzw.  $r_{\text{Kern}}$  berechnen. Sie sind im primordialen Fall (Abbildung 6.24) etwas höher als im heutigen (Abbildung 6.21), nicht aber um das Tausendfache, wie von Ripamonti et al. [50] behauptet.

## 6.4 Variation der Modellannahmen

Dieser Abschnitt widmet sich der Frage, ob die Wahl der Anfangswerte für die Entwicklung der protostellaren Wolke eine Rolle spielt. Wie in Abschnitt 6.2.2 wurden Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen Anfangswerten der Strukturvariablen durchgeführt. Auch bei den Modellen mit Berücksichtigung der chemischen Entwicklung stellt sich heraus, dass die Wahl der Anfangswerte auf die Entwicklung des Objektes nur einen geringen Einfluss hat, auch hier geht während der isothermen bzw. selbstähnlichen Phase die Erinnerung an die Anfangsbedingungen verloren. Im Einzelnen wurden folgende Rechnungen durchgeführt:

### 6.4.1 Opazität variabel

Der Einfluss der Opazität auf die Entwicklung der protostellaren Wolke wurde detailliert in Abschnitt 6.3.3 beschrieben. Abbildung 6.27 zeigt zum Vergleich die Endstadien der in Abschnitt 6.3.3 gezeigten Modellrechnungen.

Der deutlichste Unterschied zwischen den Modellen ist im Temperaturverlauf des äußeren Bereichs zu erkennen: während im PopI-Fall die Temperatur nicht steigt (da durch die Anwesenheit von Staub die Kühlung gut ist), heizt sich das Gas im primordialen Fall auch im Außenbereich auf bis zu 1000 K auf (hier ist nur wenig  $\text{H}_2$  vorhanden, daher ist die Kühlung schlecht).

### 6.4.2 Anfangstemperatur konstant, Anfangsteildichte und Opazität variabel

Modelle mit gleicher Anfangstemperatur ( $T_{\text{init}} = 200 \text{ K}$ ), aber unterschiedlicher Anfangsteildichte ( $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_{\text{init}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_{\text{init}} = 10^6 \text{ cm}^{-3}$ ) haben konstruktionsbedingt eine unterschiedliche Gesamtmasse, damit auch einen unterschiedlichen Gesamtradius. Darüber hinaus können die Modelle mit der höheren Anfangsteildichte als spätere Entwicklungsphase eines Modells mit geringerer Anfangsteildichte gesehen werden (die Erinnerung an die Anfangswerte geht im Laufe der isothermen Anfangsphase verloren).

---

<sup>9</sup>In dieser Abbildung ist auch ansatzweise zu sehen, wie sich ein erster und zweiter Kern gebildet haben, die im primordialen Fall etwas schwächer ausgeprägt, aber dennoch sichtbar sind.

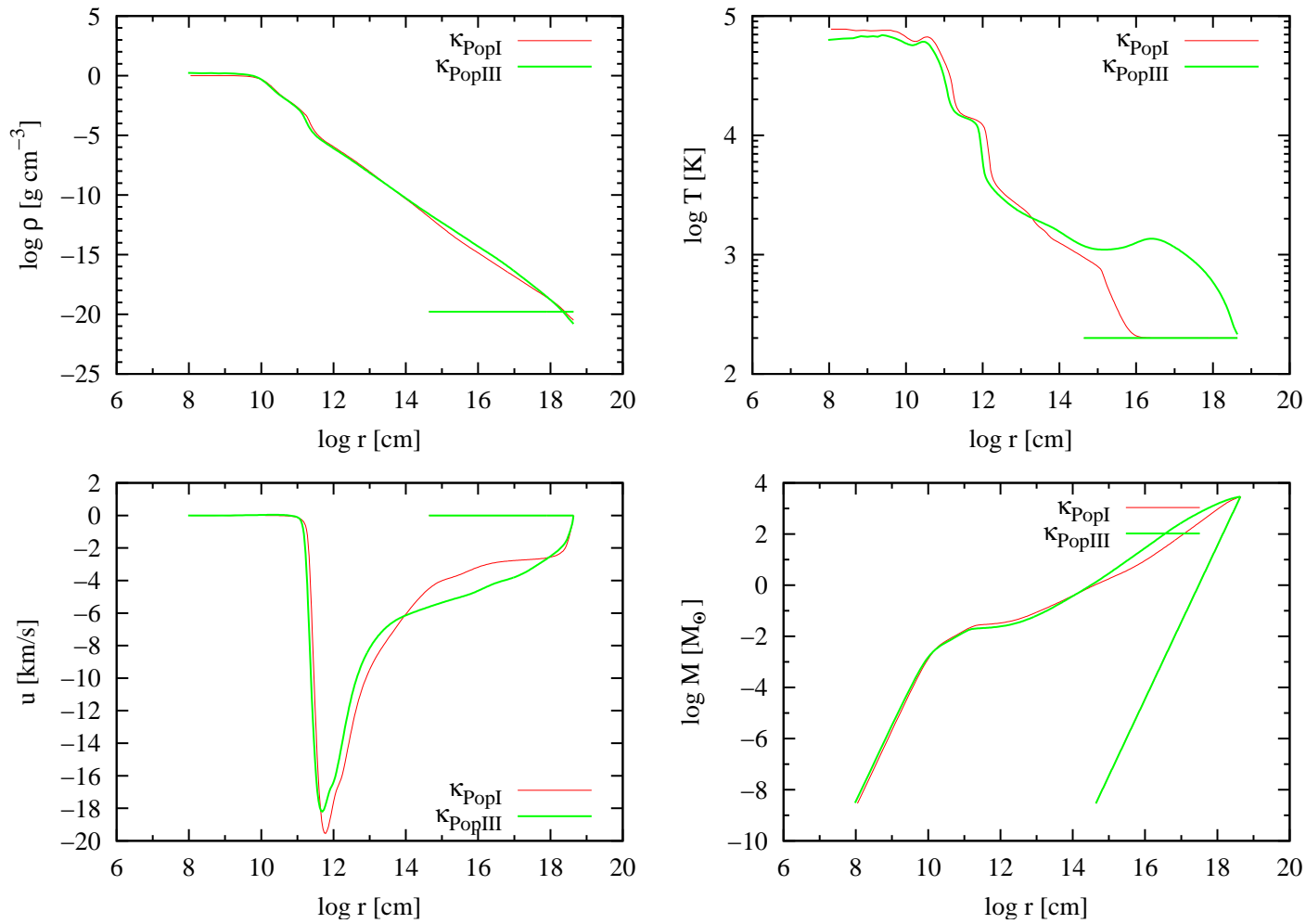


Abbildung 6.27: Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk und PopIII-Opazität bzw. PopI-Opazität. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung, wenn im Zentrum  $t = 10^5 \text{ K}$  erreicht wird.

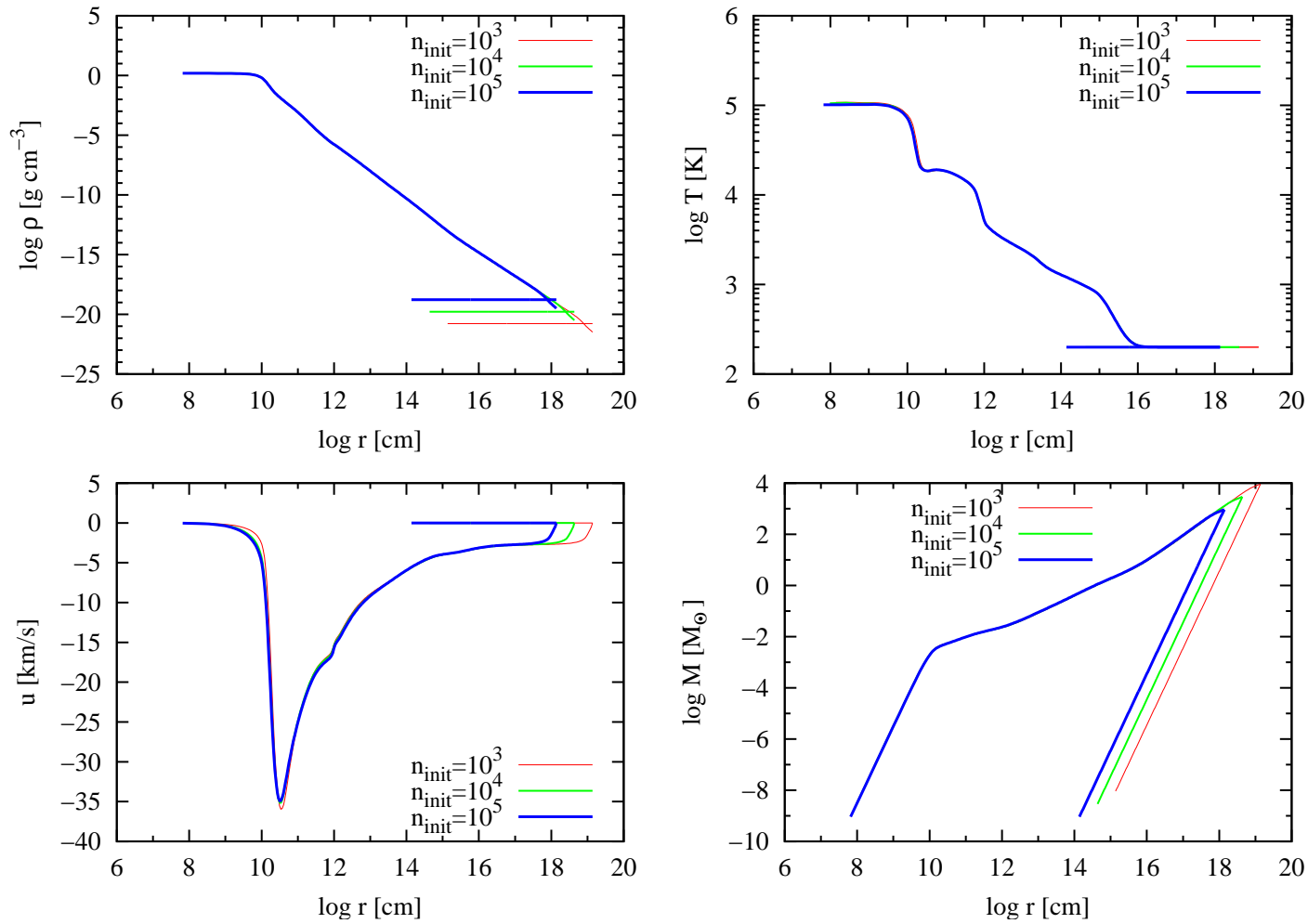


Abbildung 6.28: Modellrechnungen mit PopI-Opazität und konstanter Anfangstemperatur von  $T_{\text{init}} = 200$  K und unterschiedlicher Anfangsdichte. Die Anfangsteildichte betrug  $10^4$   $\text{cm}^{-3}$ ,  $10^5$   $\text{cm}^{-3}$ , und  $10^6$   $\text{cm}^{-3}$ . Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

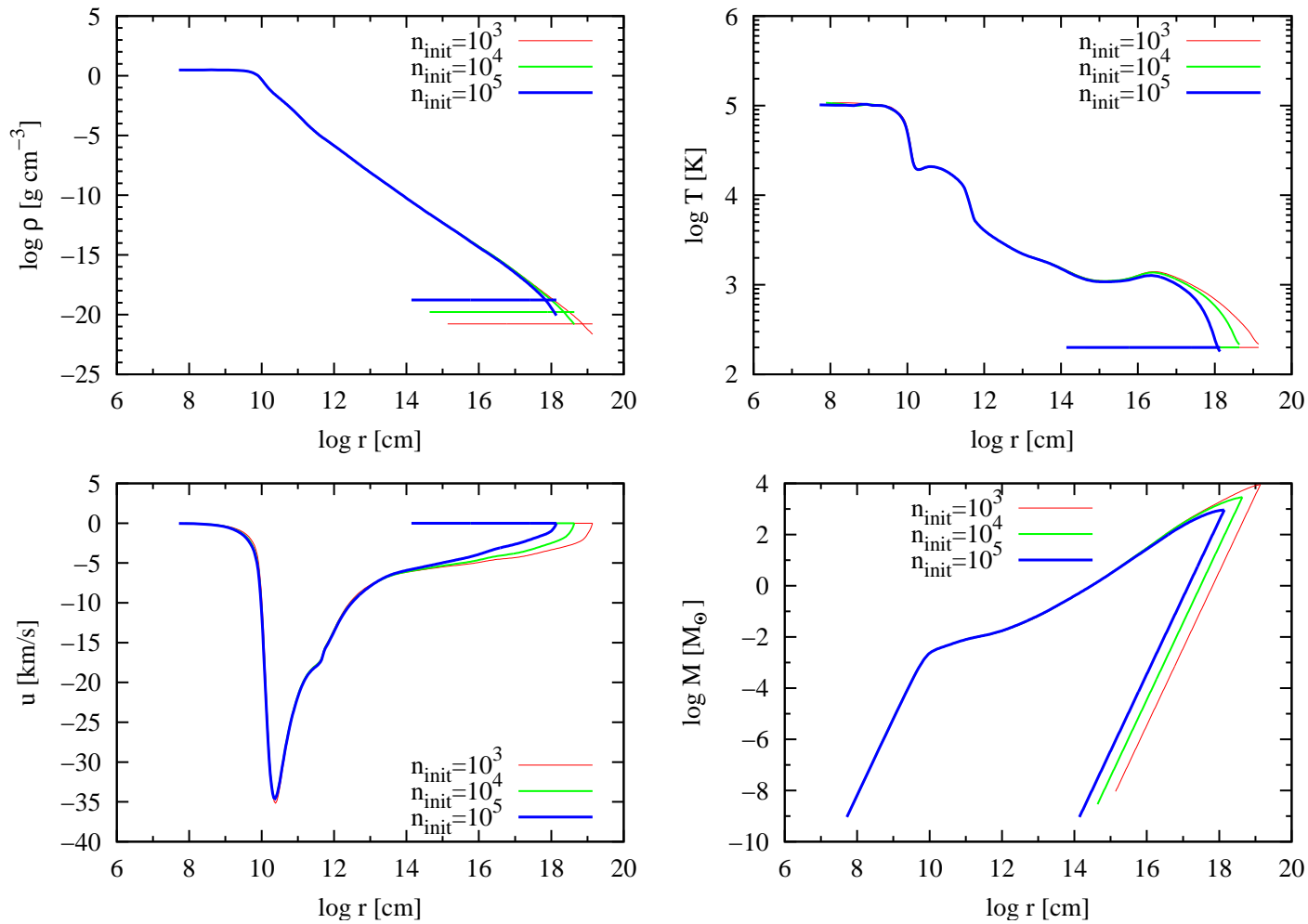


Abbildung 6.29: Modellrechnungen mit PopIII-Opazität und konstanter Anfangstemperatur von 200 K und unterschiedlicher Anfangsdichte. Die Anfangsteildichte betrug  $10^4$  cm $^{-3}$ ,  $10^5$  cm $^{-3}$ , und  $10^6$  cm $^{-3}$ . Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

Die Endstadien der Modelle (Abbildungen 6.28 und 6.29 für PopI- bzw. PopIII-Opazität) sind kaum voneinander zu unterscheiden; nur im äußeren Bereich sind geringfügige Unterschiede, die durch den jeweils leicht verschiedenen Gesamtradius (der konstruktionsbedingt konstant gehalten wird) zu erklären sind, zu erkennen.

### 6.4.3 Anfangsteilchendichte konstant, Anfangstemperatur und Opazität variabel

Wird die Anfangstemperatur bei konstant gehaltener Anfangsteilchendichte ( $n_{\text{init}} = 10^4 \text{ cm}^{-3}$ ) variiert ( $T_{\text{init}} = 100 \text{ K}$ ), ergeben sich Modelle, deren Entwicklungen sich nur in quantitativer Weise voneinander unterscheiden.

Die Jeansmasse hängt stärker von der Temperatur als von der Dichte ab ( $M_J \sim T^{3/2} \rho^{-1/2}$ ), sodass der Massenunterschied bei Modellen mit veränderter Anfangstemperatur vergleichsweise stärker ausfällt als bei variiertem Anfangsteilchendichte. Dies zeigt sich auch in den Modellen (Abbildung 6.30 und 6.31). Je höher die Anfangstemperatur, desto größer die Gesamtmasse, und bei gleicher Zentraltemperatur am Ende der Rechnung ( $T = 10^5 \text{ K}$ ) umso geringer die Zentraldichte und maximale Einfallgeschwindigkeit.

### 6.4.4 Unterschiedliche chemische Anfangszusammensetzung

Hier wird die Anfangszusammensetzung variiert:  $f_{\text{H}_2}$  beträgt  $5 \cdot 10^{-10}$  statt  $5 \cdot 10^{-4}$ . Wie Abbildungen 6.32 und 6.33 zeigen, hat die Wahl des Anfangswertes keinen Einfluss auf den Endzustand. Dies hängt damit zusammen, dass im Laufe der Rechnungen die Dichte immer Werte erreicht, die hoch genug sind, um sämtlichen Wasserstoff bis auf vernachlässigbare Restmengen über Dreiteilchenreaktionen in  $\text{H}_2$  umzuwandeln. Spätestens ab diesem Punkt in der Entwicklung geht die Erinnerung an die Anfangshäufigkeiten der chemischen Spezies verloren. In diesem Zusammenhang gibt es keine untere Schwelle für  $f_{\text{H}_2}$  für ausreichend effiziente Kühlung.

## 6.5 Vergleich mit früheren Rechnungen

In dieser Arbeit wurden aktuellere, über einen größeren Dichte- und Temperaturbereich gültige Opazitätstabellen benutzt, die außerdem, was das Planckmittel des Massenabsorptionskoeffizienten angeht, die Opazität unter Verwendung der aus der Lösung des chemischen Netzwerks sich ergebende Teilchenkonzentrationen ermittelt, anstatt ein eventuell nicht gegebenes chemisches Gleichgewicht voraussetzen zu müssen. Darüber hinaus wurden Hydrodynamik, Strahlungstransport und Chemie selbstkonsistent implementiert. Es wird keine künstliche Aufteilung zwischen optisch dickem Kern und optisch dünner Hülle benötigt. Das implizite Zeitintegrationschema umgeht die Beschränkung

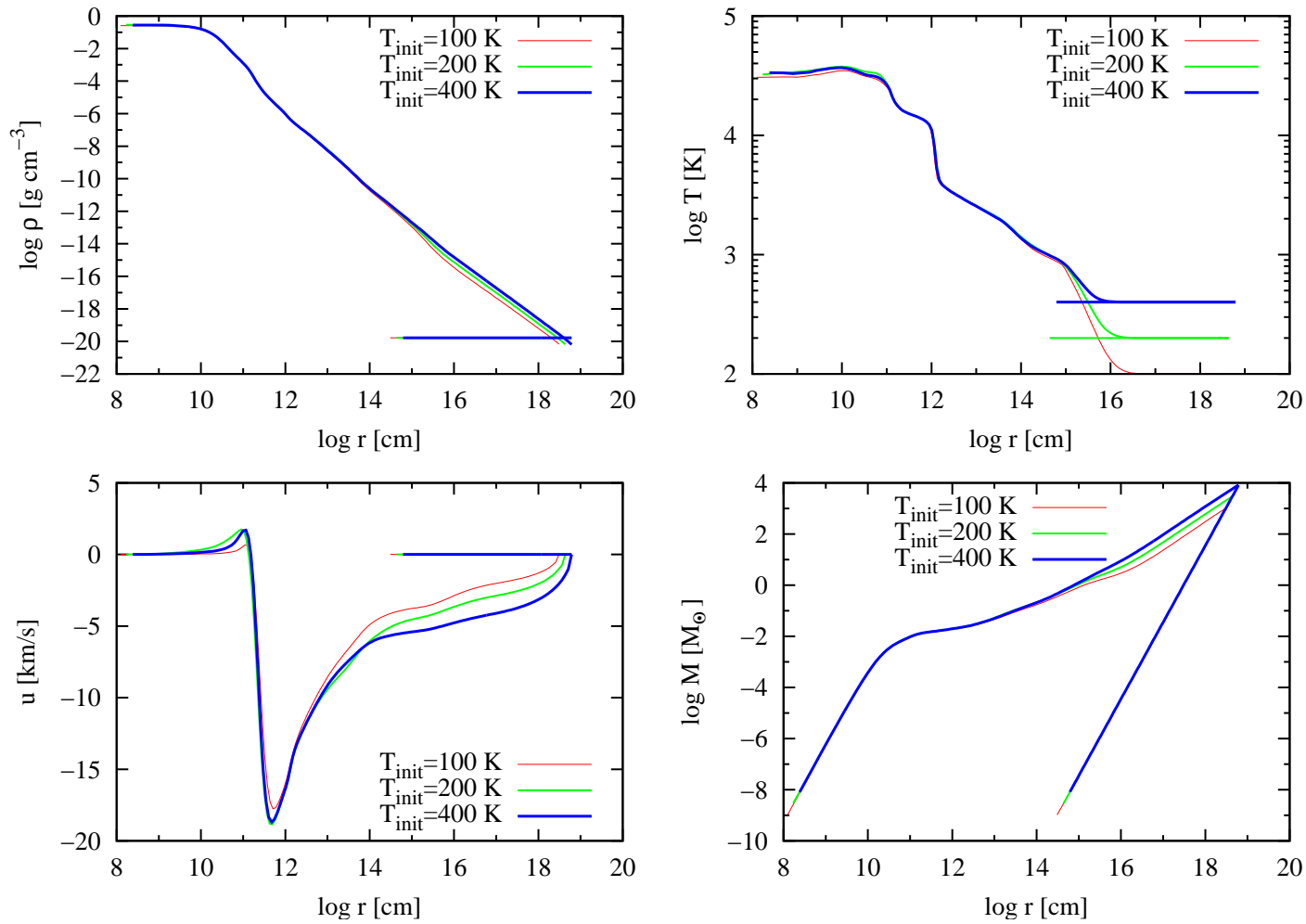


Abbildung 6.30: Modellrechnungen mit PopI-Opazität und konstanter Anfangsteilchendichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  und unterschiedlicher Anfangstemperatur, die 100, 200 und 400 K betrug. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.



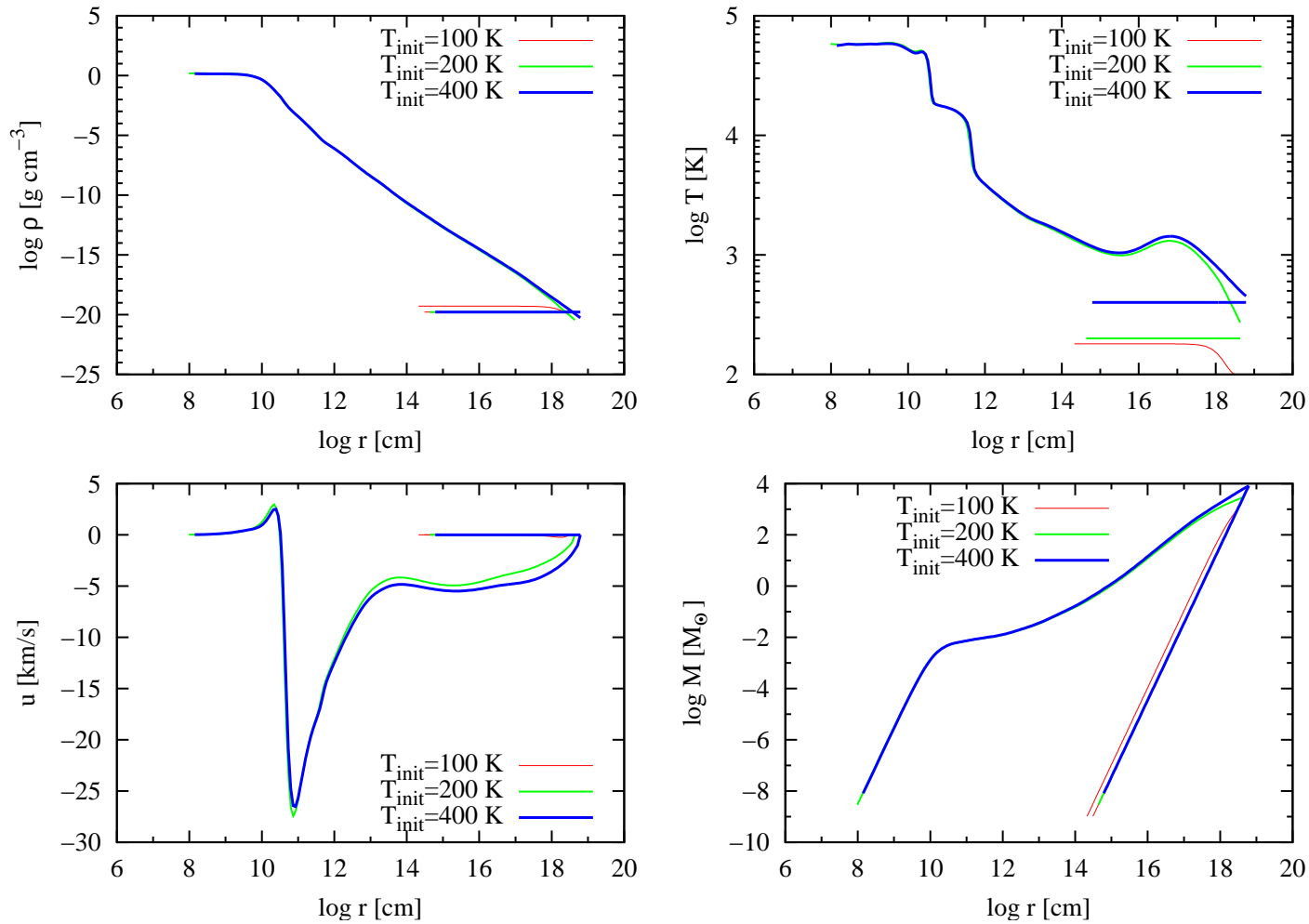


Abbildung 6.31: Modellrechnungen mit PopIII-Opazität und konstanter Anfangsteildichte von  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  und unterschiedlicher Anfangstemperatur, die 100, 200 und 400 K betrug. Aufgetragen sind jeweils die Anfangs- und Endstadien der entsprechenden Modellrechnung.

hinsichtlich der zulässigen Zeitschrittweite durch die CFL-Bedingung, die Ripamonti et al. [50] dazu zwingt ihre Modellrechnungen selbst bei Einfrieren des Kernbereichs mit Erreichen einer Zentraltemperatur von  $10^5$  K zu beenden.

Omukai & Nishi [42] benutzen in ihren Rechnungen ein äquidistantes Lagrangegitter. Am Ende ihrer Simulationsrechnungen nimmt der Anteil molekularen Wasserstoffs im Zentrum des Objektes trotz Temperaturen über  $5 \cdot 10^4$  K erneut zu. Dieses Verhalten wird weder von Ripamonti et al. [50] noch in der vorliegenden Arbeit beobachtet. Es gibt auch keinen physikalisch plausiblen Grund, wieso dies der Fall sein sollte, sodass an dieser Stelle sich die Vermutung aufdrängt, dass die chemischen Reaktionen in der Arbeit von Omukai & Nishi nicht korrekt berechnet wurden.

In der Arbeit von Ripamonti et al. [50] unterliegt die numerische Behandlung des Stoßes gewissen Einschränkungen, da die Autoren mit einem starren Lagrangegitter arbeiten und den Stoß mittels künstlicher Viskosität über mehrere Gitterzellen, deren Ausdehnung über die gesamte Rechnung festgehalten wird, ausschmieren müssen. In der vorliegenden Arbeit muss zwar ebenfalls eine künstlicher Viskosität eingeführt werden (siehe Abschnitt 4.2.2), durch die Implementierung des adaptiven Gitters (Abschnitt 4.3) ist es jedoch möglich, die Auflösung im Laufe der Rechnung an die Strukturen der momentanen Lösung anzupassen, sodass die Behandlung des Stoßes insgesamt etwas besser gelingt. So wird beispielsweise in der vorliegenden Arbeit keine atomare Übergangsregion zwischen dem ionisierten Kern und der ihn umgebenden molekularen Hülle gefunden, die laut Ripamonti et al. [50] vermutlich nicht real, sondern ein numerisches Artefakt ist, das durch die unzureichende Behandlung des Stoßes erzeugt wird. Diese Unzulänglichkeit könnte auch erklären, wieso Ripamonti et al. in der Kollapsphase nur einen Kern und nicht zwei, wie im PopI-Fall zu erwarten wäre, finden. Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit deuten darauf hin, dass die Entstehung von erstem und zweitem Kern metallizitätsunabhängig ist. Dies ist plausibel, wenn man bedenkt, dass die Ursache für das Einsetzen des zweiten Kollapses in der Dissoziation von  $H_2$  liegt: Hierdurch fällt das Verhältnis der spezifischen Wärmen unter  $4/3$ , was eine Instabilität verursacht, die zum dynamischen Kernkollaps führt (siehe Abschnitt 1.2). Dies sollte nicht von der Metallizität abhängen.

Was den Strahlungstransport angeht, wird er in den Arbeiten von Omukai & Nishi [42] und Ripamonti et al. [50] recht ähnlich behandelt: Es wird Strahlungstransport in Linien und Kontinuum (in grauer Näherung) behandelt; bei Ripamonti et al. werden darüber hinaus Spektren berechnet.

In der vorliegenden Arbeit wird, durch die graue Näherung bedingt, die Abstrahlung durch Linien nur gemittelt in optisch dünner Näherung berücksichtigt. Die  $H_2$ -Linienkühlung ist nur bis zu einer Temperatur von  $T \approx 2500$  K wichtig. Bei heißerem Gas dissoziiert  $H_2$  und die Kontinuumsemission beginnt die lokale Kühlung zu dominieren (Ripamonti et al. [50]), sodass diese Einschränkung sich nur in den Anfangsstadien der Simulationsrechnungen auswirkt.

Das in dieser Arbeit implementierte chemische Netzwerk unterscheidet sich von dem in oben genannten Arbeiten vor allem durch die Berücksichtigung der Spezies  $H_2^+$  und  $H_3^+$ ; auch die Ratenkoeffizienten sind bei einigen Reaktionen, die allen Arbeiten gemein sind, leicht anders, dadurch ergeben sich kleine Unterschiede in den chemischen Häufigkeiten am Ende der Rechnungen, aber keine qualitativen Unterschiede.

Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit ergeben im Einklang mit anderen Arbeiten (Banerjee et al. [6], Omukai & Nishi [42]), dass der Kollaps von außen nach innen verläuft, es wurden keine inside-out Kollapslösungen nach Shu [53] gefunden. Es gibt viele Arbeiten, die den inside-out-Kollaps nach Shu als Schätzung für das dynamische Verhalten des Gases beim Kollaps benutzen. Diese scheint problematisch zu sein.

## 6.6 Folgerungen für die Entstehung von PopIII-Sternen

Es müssen zwei Bedingungen erfüllt werden, damit aus einer Gaswolke ein Stern entstehen kann: einerseits muss ihre Masse einen kritischen Wert überschreiten (Jeansmasse), so dass die Wolke gravitativ instabil ist und durch ihre Eigengravitation kontrahiert, andererseits muss die durch die Kontraktion freiwerdende Energie abgestrahlt werden können.

In dieser Arbeit wurden die Anfangsmodelle stets so konstruiert, dass sie gravitativ instabil waren, die Frage nach ausreichender Abstrahlung wurde durch die Rechnungen beantwortet: Die Kontraktionsenergie kann stets abgestrahlt werden. Dieses Verhalten wurde in sämtlichen Modellen beobachtet.

Ob die Wolke zu einem späteren Zeitpunkt ihrer Entwicklung weiter fragmentieren würde, ist mit eindimensionalen Modellen nicht zu klären; in diesem Sinne beginnen die Simulationsrechnungen dieser Arbeit mit dem Ergebnis der letzten Fragmentation. Die Jeansmasse ist eine Funktion der Temperatur und der Dichte ( $M_J \sim T^{3/2} \cdot \rho^{-1/2}$ ), sie ändert sich also im Laufe der Entwicklung, was eine Fragmentation der Wolke zur Folge haben kann. Stabilitätsanalysen (Abel et al. [2]) haben in der Tat Instabilitäten gefunden; diese breiten sich aber nach Aussage der Autoren zu langsam aus, um eine weitere Fragmentation der Wolke nach sich zu ziehen.

Es wurde untersucht, welche Rolle die Entwicklung der chemischen Zusammensetzung der Wolke in der protostellaren Phase spielt. Dazu wurden Modelle implementiert, bei denen das chemische Netzwerk ein- und ausgeschaltet werden kann. Selbst die verhältnismäßig einfachen Modelle suggerieren, dass die Bildung von PopIII-Sternen möglich ist, d.h. es bildet sich keine Gaswolke, die sich mangels Abstrahlung stabilisiert und nicht weiterentwickelt, sondern es werden in endlicher Zeit tatsächlich beinahe stellare Dichte- und Temperaturwerte erreicht. Die H<sub>2</sub>-Häufigkeit ist in allen Fällen ausreichend hoch, um die Abstrahlung der Kompressionsenergie zu gewährleisten; unabhängig von der Anfangshäufigkeit kann der gesamte Wasserstoff in die molekulare Form übergehen, sobald die Dichte ausreicht, um die Dreiteilchenprozesse effizient werden zu lassen.

Ferner wurde der Frage nachgegangen, inwiefern sich die Kopplung zwischen Gas und Strahlungsfeld auf die Entwicklung der Gaswolke auswirkt. Hierfür wurden zwei unterschiedliche Ansätze zur Modellierung der Opazität implementiert und Modellrechnungen mit ihnen durchgeführt.

Aufgrund der hohen Jeansmasse, die sich aus robusten und begründbaren Anfangsbedingungen ergibt, lag die Gesamtmasse der Modelle im Bereich von  $10^3 M_\odot$ . Die Protosterne, die sich in ihrem Inneren gebildet haben, waren stets massiv, ebenso wie der hydrostatische Kern.

## 6.6. FOLGERUNGEN FÜR DIE ENTSTEHUNG VON POPIII-STERNEN

---

Die Ergebnisse dieser Arbeit sprechen für die Möglichkeit der Bildung massiver PopIII-Sterne. Es wird keine Aussage über die Bildung massearmer PopIII-Sterne gemacht, da die Anfangswerte eine hohe Jeansmasse nach sich ziehen und Fragmentation in den Modellen nicht berücksichtigt werden kann.

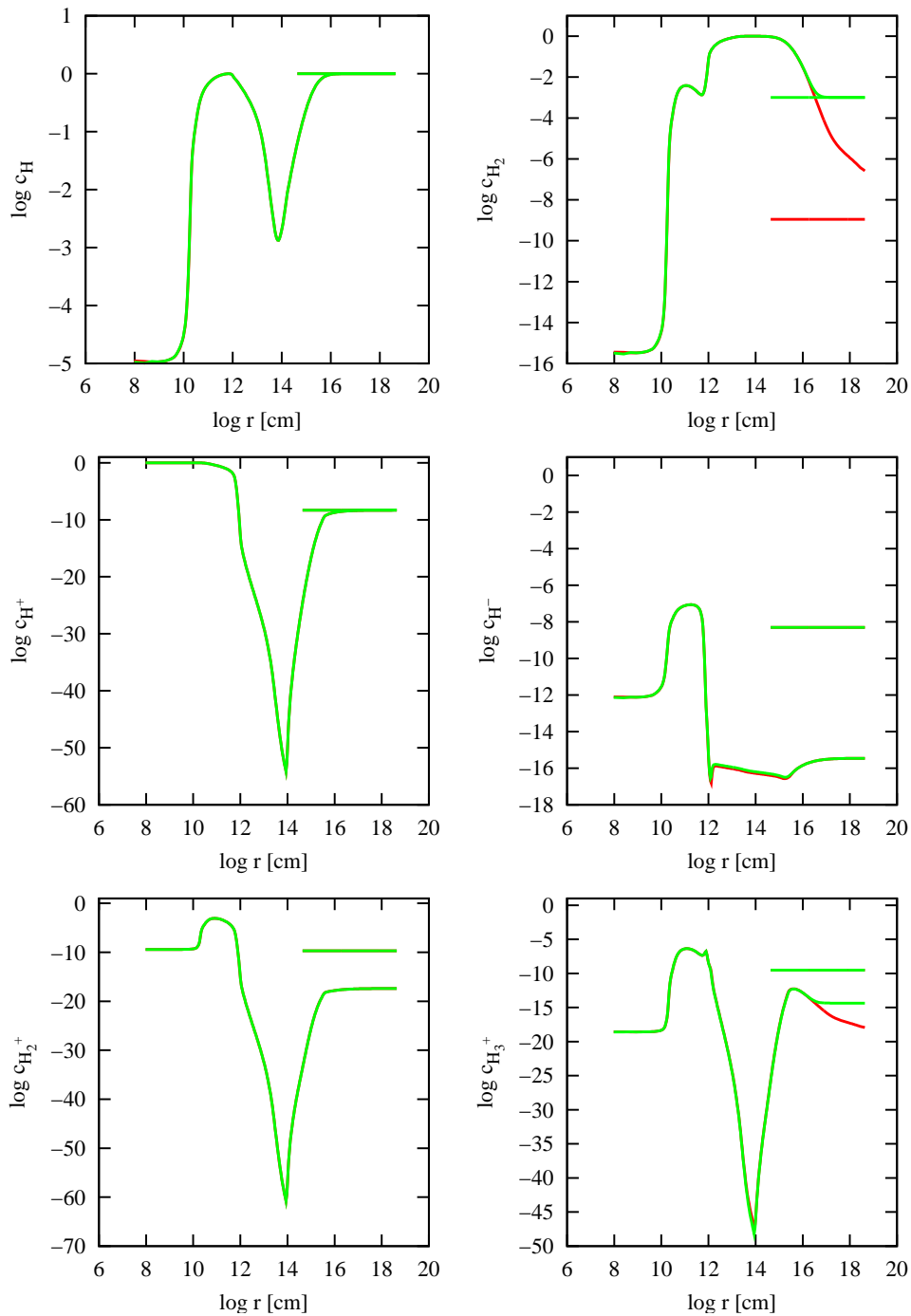


Abbildung 6.32: Modellrechnung mit PopI-Opazität und unterschiedlicher Anfangszusammensetzung ( $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-4}$  (grüne Linie) bzw.  $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-10}$  (rote Linie)). Aufgetragen sind jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate die Konzentrationen bzgl. der Wasserstoffkerne von H, H<sub>2</sub> (obere Zeile) H<sup>+</sup>, H<sup>-</sup> (mittlere Zeile) H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>3</sub><sup>+</sup> (untere Zeile) für das Anfangs- und das Endmodell.

## 6.6. FOLGERUNGEN FÜR DIE ENTSTEHUNG VON POPIII-STERNE

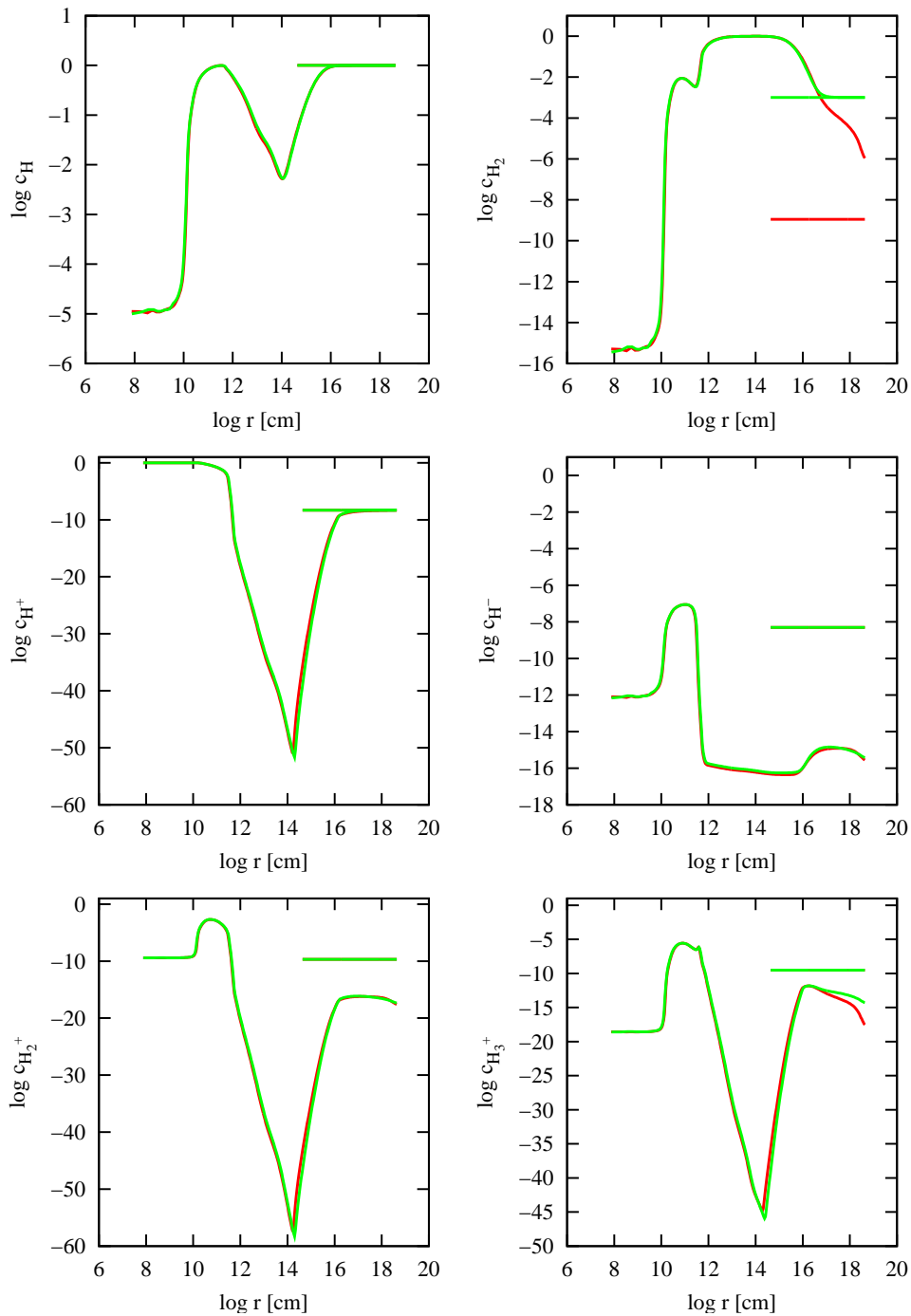


Abbildung 6.33: Modellrechnung mit PopI-Opazität und unterschiedlicher Anfangszusammensetzung ( $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-4}$  (grüne Linie) bzw.  $f_{\text{H}_2} = 5 \cdot 10^{-10}$  (rote Linie)). Aufgetragen sind jeweils in Abhängigkeit von der Radialkoordinate die Konzentrationen bzgl. der Wasserstoffkerne von H, H<sub>2</sub> (obere Zeile) H<sup>+</sup>, H<sup>-</sup> (mittlere Zeile) H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>3</sub><sup>+</sup> (untere Zeile) für das Anfangs- und das Endmodell.

# Zusammenfassung und Diskussion

Es gibt trotz derzeit (noch) fehlender Beobachtungshinweise gute Gründe, die für die Existenz von PopIII-Sternen sprechen.

Es ist umstritten, ob es gelingen kann PopIII-Sterne durch Beobachtungen nachzuweisen; sollten sich im frühen Universum ausschließlich massereiche PopIII-Sterne gebildet haben, so wären diese nach wenigen  $10^6$  Jahren als Supernovae explodiert und heute nur noch indirekt über die Spuren, die diese Ereignisse in der chemischen Zusammensetzung des ISM (Karlsson et al. [27]) bzw. im CIB (Kashlinsky et al. [28]) hinterlassen haben, nachzuweisen. Die Supernovae hätten andere primordiale Sterne mit Metallen verunreinigt, so dass diese nicht unmittelbar von Sternen späterer Generationen zu unterscheiden wären. Es gibt aber auch Überlegungen, wonach es im IGM Bereiche geben könnte, die heute noch aus primordiales bzw. metallfreiem Gas bestehen, in denen sich Sterne bilden könnten, die ebenfalls als PopIII-Sterne zu sehen wären.

Wie in anderen Gebieten der Astrophysik, ist man auch und gerade bei dem Verständnis der Entstehung und Entwicklung der ersten Sternengeneration auf numerische Simulationen angewiesen. In den letzten Jahren ist diese Fragestellung im wesentlichen aus zwei Perspektiven angegangen worden: Historisch etwas älter sind Rechnungen, die sich mit der Entstehung und Entwicklung einzelner Objekte befassen. Hierbei handelt es sich meistens um eindimensionale Rechnungen, die nicht selten mit erheblichen Vereinfachungen, was die Modellannahmen angeht, arbeiten. So werden beispielsweise stark idealisierte Strukturen (z.B. singuläre isotherme Kugeln) angenommen oder die Kopplung zwischen Hydrodynamik und Chemie wird vernachlässigt.

Neueren Datums sind Modellrechnungen zur kosmologischen Strukturbildung im frühen Universum. Hierbei handelt es sich um aufwendige dreidimensionale Simulationsrechnungen, die viele Einzelheiten beinhalten, aber noch nicht in der Lage sind, bis in den Bereich der Sternentstehung vorzudringen (Banerjee et al. [6]). Die Auflösungsgrenze dieser Simulationsrechnungen wird kurz nach dem Entstehen des primordialen Gegenstücks einer heutigen Molekülwolke erreicht. In diesem Sinne liefern sie die Anfangswerte für die in der hier vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationsrechnungen. Es zeigt aber auch, dass eindimensional rechnende Arbeiten selbst heute noch nicht obsolet geworden sind.

Es wurden Modellrechnungen zur protostellaren Entwicklung durchgeführt, die mit einer homogenen Wolke beginnen und mit der Entstehung eines Protosterns zu einem festgelegten Zeitpunkt in der Akkretionsphase beendet wurden. Allen Rechnungen gemein war, in Einklang mit ähnlichen Arbeiten, dass es charakteristische Massenskalen

für die durchlaufenen Entwicklungsstadien gibt:

- Aus Simulationsrechnungen zur kosmologischen Strukturbildung im frühen Universum geht hervor, dass die ersten Sterne in prägalaktischen Halos von etwa  $10^5 M_{\odot}$  entstanden sein müssen.
- Die typische primordiale Molekülwolke hätte eine Masse von einigen tausend Sonnenmassen gehabt; dies entspricht größenordnungsmäßig der Jeansmasse einer Wolke mit  $10^4 \text{ cm}^{-3}$  und  $T \approx 10^2 \text{ K}$ . Diese Zahlenwerte sind durch die Mikrophysik von Wasserstoff zu verstehen; sie ergaben sich auch aus Simulationsrechnungen, die mit unterschiedlichen Methoden die Strukturbildung im frühen Universum nachgebildet haben. Die Jeansmasse einer Wolke mit dieser Dichte und Temperatur beträgt einige tausend Sonnenmassen. In diesem Sinne kann von einem Überlapp der dreidimensionalen Simulationsrechnungen, deren Auflösungsgrenze etwa in diesem Bereich erreicht ist, mit den Anfangsbedingungen von eindimensionalen Rechnungen, die sich mit der Entwicklung einzelner Objekte befassen, gesprochen werden.
- Beim Kollaps der primordialen Molekülwolke entsteht im Zentrum ein Fragment von etwa  $10^2 M_{\odot}$ , der primordiale Protostern, dessen Rand/Oberfläche in dieser Arbeit über die optische Tiefe definiert wird. Eindimensionale Rechnungen können über weitere Fragmentation dieses Objektes keine Aussagen machen, etwa wenn im Laufe der Entwicklung die lokale Jeansmasse überschritten würde, es gibt aber Gründe zur Annahme, dass es zu keiner weiteren Fragmentation kommt<sup>10</sup>.
- Der hydrostatische Kern dieses Fragments wächst durch Akkretion auf eine Gesamtmasse, die im Bereich einer Sonnenmasse liegt, an. Die Akkretionsrate hängt stark von den Einzelheiten der Rechnung ab.

Was die Zeitskalen der Entwicklung betrifft, haben die Simulationen dieser Arbeit ergeben, dass etwa eine freie Fallzeit, d.h. bei den angenommenen Werten für Dichte und Temperatur größenordnungsmäßig  $10^5$  Jahre, vergeht, bevor das Zentrum der primordialen Molekülwolke soweit komprimiert und verdichtet ist, dass sich ein optisch dicker Kern bildet. Von hier an schreitet die Entwicklung beinahe schlagartig voran: innerhalb weniger tausend Jahre bildet sich ein hydrostatischer Kern, der seinerseits durch Akkretion wächst und sich innerhalb von nur wenigen Jahren stark aufheizt und verdichtet. Der Unterschied dieser Zeiten erklärt sich durch die stark unterschiedliche Dichte des Gases (anfangs  $10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ , bei der Kernbildung  $1 \text{ g cm}^{-3}$  oder mehr) und dem Zusammenhang mit der dynamischen Zeitskala ( $t_{ff} \sim \rho^{-1/2}$ ).

Die Entwicklung primordialer Sterne unterscheidet sich, was die Zeitskalen angeht, von PopI-Sternen dadurch, dass bei letzteren tausende Jahre zwischen dem erstmaligen Erreichen von  $\tau_R = 2/3$  und der Bildung des hydrostatischen Kerns vergehen, während es im primordialen Fall allenfalls Jahre sind. Wobei zu bemerken ist, dass die Definition des Alters des Protosterns über die optische Tiefe bei sehr unterschiedlichen Opazitätswerten durchaus einen Einfluss auf die Zahlenwerte hat: die Opazität des primordialen

---

<sup>10</sup>Stabilitätsanalysen haben gezeigt, dass es durchaus zu Instabilitäten kommen kann, diese wachsen aber nicht schnell genug um das gesamte Objekt zu fragmentieren.



Gases ist erheblich geringer als die im heutigen Fall, deswegen muss primordiales Gas im Vergleich zu metallhaltigem sehr viel stärker komprimiert werden, um die gleiche optische Tiefe (z.B.  $\tau = 2/3$ ) zu erreichen.

Die chemische Zusammensetzung des Gases hat einen starken Einfluss auf das thermische Verhalten des Gases, somit auch auf seine hydrodynamische Entwicklung. Die Genauigkeit der Simulation der chemischen Entwicklung ist durch Unkenntnis einiger Reaktionsraten, insbesondere bei tiefen Temperaturen und Dichten begrenzt, dennoch ist beim Vergleich von Simulationsrechnungen, die mit bzw. ohne Berücksichtigung der chemischen Entwicklung durchgeführt wurden, deutlich zu sehen, wie unterschiedlich sich die Objekte entwickeln.

Ein Nachteil von 3D-AMR-Rechnungen ist die begrenzte Auflösung; in der hier vorliegenden Arbeit ist es gelungen, durch die Kombination des eindimensionalen Ansatzes mit einem adaptivem Gitter und impliziter Zeitintegration

- bis zu 20 Größenordnungen in der Dichte,
- 10 Größenordnungen in der radialen Komponente,
- 5 Größenordnungen in der Temperatur,
- über 100 Größenordnungen in der Konzentration der chemischen Spezies

aufzulösen.

Die Simulationsrechnungen wurden als sequentieller Code in Fortran90 implementiert, der auf einem handelsüblichen PC ausgeführt wurde.

## ZUSAMMENFASSUNG UND DISKUSSION

---

## Anhang A

# Bestimmung des Eddingtonfaktors durch die numerische Lösung der Strahlungstransportgleichung

In Abschnitt 2.2.1 wurde der Eddingtonfaktor  $f_{\text{Edd}}$ , der zur Schließung der Momentengleichungen (2.10) und (2.11) des Strahlungsfeldes benötigt wird, eingeführt. Für fast isotrope Strahlungsfelder ist die Eddingtonnäherung (2.12) eine gute Approximation. Genauer ist es aber, den Eddingtonfaktor aus den Momenten des Strahlungsfeldes zu berechnen. Eine Möglichkeit zur hierfür notwendigen numerischen Lösung der Strahlungstransportgleichung soll in diesem Anhang für den sphärischen Fall beschrieben werden. Eine detaillierte Beschreibung der Vorgehensweise ist in Yorke [71] zu finden.

### A.1 Grundgleichungen und Definitionen

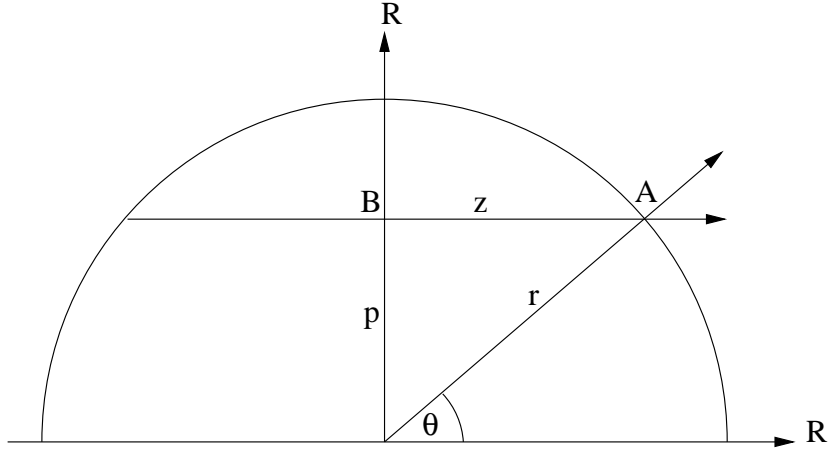
Die zeitabhängige nichtrelativistische Strahlungstransportgleichung in sphärischer Symmetrie (einschließlich Streuung) lautet:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + \mu \frac{\partial I_\nu}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_\nu}{\partial \mu} = -\kappa_\nu^{\text{Abs}}(r) I_\nu + j_\nu(r) - \kappa_\nu^{\text{Str}}(r) \left( I_\nu - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I_\nu(r, \mu', t) \Phi_\nu(\mu, \mu') d\mu' \right). \quad (\text{A.1})$$

$I_\nu = I_\nu(r, \mu, t)$  ist die Intensität der Strahlung der Frequenz  $\nu$  zur Zeit  $t$  am Radius  $r$  und der Ausbreitungsrichtung  $\mu = \cos \theta$  ( $\theta$  ist der Winkel zwischen der auswärts gerichteten Normalen und der Richtung des Photons),  $j_\nu(r)$  ist die isotrope Emissivität,  $\kappa_\nu^{\text{Abs}}(r)$  und  $\kappa_\nu^{\text{Str}}(r)$  sind die frequenzabhängigen Absorptions- und Streukoeffizienten am Radius  $r$ .  $\Phi_\nu(\mu, \mu')$  ist die Phasenfunktion, die die Wahrscheinlichkeit einer Streuung aus der Richtung  $\mu'$  in die Richtung  $\mu$  angibt. Sie ist so normiert, dass für alle Richtungen  $\mu$

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Phi(\mu, \alpha) d\alpha = 1$$

gilt.


Abbildung A.1: Darstellung der  $pz$ -Ebene.

Nach der Variablentransformation

$$(r, \mu) \rightarrow (r, p), \quad p = r\sqrt{1 - \mu^2} \quad (\text{A.2})$$

$$I_\nu(r, \mu, t) \rightarrow \begin{cases} I_\nu^+(r, p, t) & \mu \geq 0 \\ I_\nu^-(r, p, t) & \mu < 0 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

wird Gleichung (A.1) in zwei getrennte Gleichungen

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu^+}{\partial t} + \mu \frac{\partial I_\nu^+}{\partial r} = -(\kappa_\nu^{\text{Abs}} + \kappa_\nu^{\text{Str}})[I_\nu^+ - S_\nu] \quad (\text{A.4})$$

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu^-}{\partial t} + \mu \frac{\partial I_\nu^-}{\partial r} = (\kappa_\nu^{\text{Abs}} + \kappa_\nu^{\text{Str}})[I_\nu^- - S_\nu] \quad (\text{A.5})$$

für eine positive und eine negative Komponente  $I^+$  bzw.  $I^-$  aufgespalten, weil durch die unabhängige Variable  $p$  nicht zwischen  $\mu > 0$  und  $\mu < 0$  unterschieden werden kann. Der Parameter  $p$  (vergleiche Abbildung A.1) wird Stoßparameter genannt, er kann für einen gegebenen Radius  $r$  Werte zwischen 0 und  $r$  annehmen.

Im Fall isotroper Streuung ( $\Phi_\nu(\mu, \mu') = 1$ ) und im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht kann die Quellfunktion  $S_\nu$  folgendermaßen geschrieben werden:

$$S_\nu = \frac{1}{\kappa_\nu^{\text{Abs}} + \kappa_\nu^{\text{Str}}} \left( \sum_i (\kappa_\nu^{\text{Abs},i} B_\nu^i + \kappa_\nu^{\text{Str},i} J_\nu) \right). \quad (\text{A.6})$$

Hier sind  $\kappa_\nu^{\text{Abs},i}$  und  $\kappa_\nu^{\text{Abs},i} B_\nu^i$  der Absorptionskoeffizient der Spezies  $i$  bzw. deren Beitrag zur Emissivität und  $\kappa_\nu^{\text{Str},i}$  und  $\kappa_\nu^{\text{Str},i} J_\nu$  der Streukoeffizient der Spezies  $i$  bzw. deren Beitrag zur Streustrahlung.  $J_\nu$  ist das nullte Moment der Strahlungsintensität. Außerdem werden noch das erste und zweite Strahlungsmoment  $H_\nu$  bzw.  $K_\nu$  benötigt. Sie sind

folgendermaßen definiert:

$$J_\nu = \frac{1}{2} \int_0^1 (I_\nu^+ + I_\nu^-) d\mu \quad (\text{A.7})$$

$$H_\nu = \frac{1}{2} \int_0^1 (I_\nu^+ - I_\nu^-) \mu d\mu \quad (\text{A.8})$$

$$K_\nu = \frac{1}{2} \int_0^1 (I_\nu^+ + I_\nu^-) \mu^2 d\mu. \quad (\text{A.9})$$

## A.2 Randbedingungen und Anfangswerte

Formuliert man die Gleichungen für eine sphärische Hülle mit Innenrand  $r_{\min}$  und Außenrand  $r_{\max}$  unter der Annahme, dass sich die Wolke in einem (i.a. zeitabhängigen, nicht isotropen) Strahlungsfeld befindet, ergibt sich als äußere Randbedingung

$$I_\nu^-(r_{\max}, p, t) = w_\nu(p, t) \quad \text{für } 0 < p < r_{\max}, \quad (\text{A.10})$$

wobei  $w_\nu(p, t)$  die auf den Außenrand treffende Strahlung beschreibt. Für den Fall isotrop verdünnter Schwarzkörperstrahlung der Temperatur  $T_{\text{ext}}$  wird  $w_\nu(p, t)$  durch den Ausdruck

$$w_\nu(p, t) = WB_\nu(T_{\text{ext}}) \quad (\text{A.11})$$

mit dem Verdünnungsfaktor  $W$  beschrieben.

Für den Innenrand muss gelten

$$I_\nu^+(p, p, t) - I_\nu^-(p, p, t) = 0 \quad \text{für } r_{\min} \leq p \leq r_{\max} \quad (\text{A.12})$$

$$I_\nu^+(r_{\min}, p, t) - I_\nu^-(r_{\min}, p, t) = h_\nu(p, t) \quad \text{für } 0 \leq p \leq r_{\min} \quad (\text{A.13})$$

falls es eine zentrale Strahlungsquelle, deren Einstrahlung auf den Innenrand durch  $h_\nu(p, t)$  beschrieben wird, gibt.

## A.3 Numerische Berechnung

Wenn die Quellfunktion  $S_\nu$  (z.B. aus dem hydrodynamischen Teil des Modells), sowie die Materialeigenschaften, die  $\kappa_\nu^{\text{Abs}, i}$  und  $\kappa_\nu^{\text{Str}}$  festlegen, bekannt sind, ist es möglich das Gleichungssystem, das durch die Gleichungen (A.4), (A.5), die Randbedingungen (A.10), (A.12) und (A.13), sowie die Definitionen (A.6), (A.7) und (A.11) bestimmt wird, zu lösen. Mit den hierdurch erhaltenen Intensitäten kann u.a. der Eddingtonfaktor berechnet werden, mit dem die Momentengleichungen geschlossen werden.

Für die Bezeichnungen der Indizes der diskreten Variablen werden folgende Bezeichnungen eingeführt:

$$\begin{array}{lll} \text{Radius } r_j: & j = 1, \dots, J & \text{mit } r_1 = r_{\min}, r_J = r_{\max} \\ \text{Stoßparameter } p_k: & k = 1, \dots, x, \dots, K & \text{mit } p_1 = 0, p_x = r_{\min}, p_k = r_{\max} \\ \text{Zeit } t_n: & n = 1, \dots & \\ \text{Frequenz } \nu_l: & l = 1, \dots, L. & \end{array}$$

### A.3. NUMERISCHE BERECHNUNG

---

Gleichungen (A.4) und (A.5) werden für die Frequenz  $\nu$  und einen festen Stoßparameter  $p_k$  betrachtet. Nach der Transformation in das Koordinatensystem

$$\alpha^\pm = \frac{1}{2}(\mu r \pm ct) \quad (\text{A.14})$$

erhält man mit  $\kappa^e(\alpha^+, \alpha^-) = \kappa^{\text{Abs}} + \kappa^{\text{Str}}$

$$\frac{\partial I^+}{\partial \alpha^+} = -\kappa^e(I^+ - S) \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial I^-}{\partial \alpha^-} = \kappa^e(I^- - S). \quad (\text{A.16})$$

$$(\text{A.17})$$

Mit den Abkürzungen

$$t^+ = t_n - \frac{1}{c}(r_j \mu_j - r_{j-1} \mu_{j-1}), \quad (\text{A.18})$$

$$t^- = t_n - \frac{1}{c}(r_{j+1} \mu_{j+1} - r_j \mu_j), \quad (\text{A.19})$$

$$x^+(r, t) = \int_{\alpha^+(r_{j-1}, t^+)}^{\alpha^+(r, t)} \sigma^e(y, \alpha^-) dy \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial x^+}{\partial \alpha^+} = \sigma^e(\alpha^+, \alpha^-), \quad (\text{A.20})$$

$$x^-(r, t) = - \int_{\alpha^-(r_{j+1}, t^-)}^{\alpha^-(r, t)} \sigma^e(\alpha^+, y) dy \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial x^-}{\partial \alpha^-} = -\sigma^e(\alpha^+, \alpha^-), \quad (\text{A.21})$$

$$\Delta\tau^\pm = x^\pm(r_j, t_n) \quad (\text{A.22})$$

und den Bezeichnungen  $\hat{I}_{j\mp 1}^\pm$  für die Werte von  $I^\pm$  an den Stellen  $(r_{j\mp 1}, t^\pm)$  ergibt die Integration von Gleichung (A.15) entlang der Kurve  $\alpha^- = \text{const}$  von  $(r_{j-1}, t^+)$  bis  $(r_j, t_n)$  und von Gleichung (A.16) entlang der Kurve  $\alpha^+ = \text{const}$  von  $(r_{j+1}, t^-)$  bis  $(r_j, t_n)$

$$I_j^+ = \hat{I}_{j-1}^+ \exp(\Delta\tau^+) + \int_0^{\Delta\tau^+} S(\alpha^+(x^+), \alpha^-) \exp(-x^+) dx^+ \quad (\text{A.23})$$

$$I_j^- = \hat{I}_{j+1}^- \exp(-\Delta\tau^-) + \int_0^{\Delta\tau^-} S(\alpha^+, \alpha^-(x^-)) \exp(-x^-) dx^-. \quad (\text{A.24})$$

Dies entspricht der Integration der Gleichungen (A.4) und (A.5) entlang ihrer Charakteristiken. Über die Gleichungen (A.23) und (A.24) können also die Intensitäten  $I^\pm$  am Radius  $r_j$  zur Zeit  $t_n$  berechnet werden, vorausgesetzt die Quellfunktion  $S$  und die Intensitäten  $\hat{I}^\pm$  sind zu einem Zeitpunkt vor  $t_n$  bekannt. Die Lösung des zeitabhängigen Systems ist sehr speicheraufwendig, denn es müssen aus dem vorangegangenen Zeitschritt  $L \times J \times K$  Werte für  $I^\pm$  im Speicher gehalten werden, darüber hinaus ist eine akzeptable numerische Genauigkeit der Lösung nur über ein eingeschränktes Zeitintervall erreichbar. Aus diesen Gründen wird es oft vorgezogen, sich auf zeitunabhängige Lösungen zu beschränken. In diesem Fall werden nur die aktuellen  $I^\pm$ -Werte benötigt, um die  $\mu$ -Integration ausführen zu können, was den Speicherbedarf drastisch reduziert.

## ANHANG A. NUMERISCHE LÖSUNG DER STRAHLUNGSTRANSPORTGLEICHUNG

Die numerische Integration einer Funktion  $f(x)$ , dessen Werte an diskreten Stützstellen  $x_i$ ,  $x_{\min} \leq x_i \leq x_{\max}$ ,  $i = 1, \dots, N$  bekannt ist, lässt sich durch eine Summenformel

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N f(x_i) a_i \quad (\text{A.25})$$

approximieren, wobei die Integrationsgewichte  $a_i$  i.a. von der Intervalllänge (d.h. dem Gitterabstand), nicht aber von der Funktion selbst abhängen. Eine elegante Art die Winkelabhängigkeit der Intensität zu eliminieren besteht in der Integration über alle Stoßparameter mit Hilfe der sog.  **$pz$ -Darstellung**.

Abbildung A.1 zeigt die Darstellung der  $pz$ -Ebene, die folgendermaßen konstruiert wird: Die (sphärische) Hülle wird in konzentrische Kugelschalen aufgeteilt, die mit dem Index  $k = 1, \dots, K$  nummeriert werden. Es wird eine Ebene, die durch den Mittelpunkt verläuft, herausgeschnitten, sodass diese Kugeln eine Schar konzentrischer Kreise mit den Radien  $p_k$  bilden. Nun wird eine Gerade durch das Zentrum gelegt. Die Kreise schneiden diese Gerade an den Abständen  $p_k$ . Senkrecht zu dieser Geraden wird eine Schar paralleler Geraden gelegt. Ein Punkt  $A$ , der auf einer dieser Geraden liegt, kann durch Angabe des Stoßparameters  $p$  und der Koordinate  $z$  eindeutig charakterisiert werden: Er hat den Abstand  $z$  vom Schnittpunkt  $B$ , dessen Abstand vom Zentrum  $p$  beträgt. Der radiale Abstand von  $A$  vom Zentrum ist somit

$$r = \sqrt{p^2 + z^2} \quad (\text{A.26})$$

Eine Gerade durch den Punkt  $A$  und das Zentrum schneidet die Gerade, auf der  $A$  liegt, unter dem Winkel  $\theta$ , der durch die Beziehung

$$\cos \theta = \sqrt{1 - \left(\frac{p}{z}\right)^2} \quad (\text{A.27})$$

bestimmt wird.

Im Folgenden werden nur noch Punkte  $A$ , die Schnittpunkte einer der konzentrischen Kreise mit einer Geraden mit Stoßparameter  $p_k$  sind, betrachtet. Eine solche Gerade schneidet alle Kreise mit Stoßparametern  $p_i$  mit  $k \leq i \leq K$ . Diese Schnittpunkte werden von 1 bis  $K - (k - 1)$  durchnummeriert. Die  $z$ -Koordinate dieser Punkte ist

$$z_i = \sqrt{p_{k-1+i}^2 - p_k^2}, \quad i = 1, \dots, K - (k - 1). \quad (\text{A.28})$$

Der radiale Abstand des Punktes mit Index  $i$  vom Zentrum ist  $p_{k-1+i}$ . Aufgrund der Symmetrie des Problems müssen nur Punkte auf der positiven  $z$ -Achse betrachtet werden.

Nun wird die Strahlungsintensität längs eines bestimmten Strahls, einmal auswärts<sup>1</sup> ( $I^+$ ) und einmal einwärts ( $I^-$ ) gerichtet, betrachtet. Diese Intensitäten auf dem Strahl mit Stoßparameter  $p_k$  am diskreten Punkt  $z_i$  werden mit  $I_{k,i}^\pm$  bezeichnet.

Wenn alle  $I_{k,i}^\pm$ -Werte bekannt sind, können die Momente  $J$ ,  $H$  und  $K$  des Strahlungsfeldes berechnet werden: Die kontinuierliche Winkelvariable  $\theta$  wird durch diskrete Werte

<sup>1</sup>d.h. zum Außenrand gerichtet

### A.3. NUMERISCHE BERECHNUNG

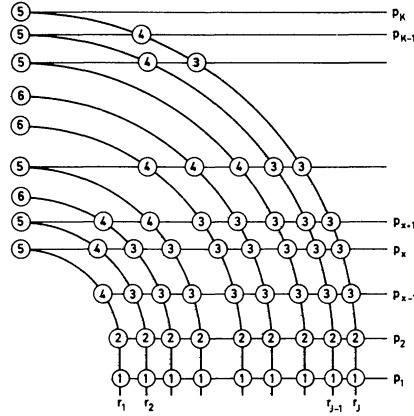


Abbildung A.2: Darstellung der  $pz$ -Ebene  $\mu$ -Integration aus Yorke [71].

1. Fall:  $k = 1$     3. Fall:  $3 \leq k \leq K - 2$  und  $r_j > p_{k+1}$     5. Fall:  $r_j \leq p_{k+1}$   
 2. Fall:  $k = 2$     4. Fall:  $r_j \leq p_{k+1}$     6. Fall:  $r_j \neq p_k$

$\theta_m$  und die Winkelintegration über  $\mu = \cos \theta$  durch eine Summenformel ersetzt. Für die diskreten Werte von  $I^\pm(\mu_m)$  werden die  $I_{k,i}^\pm$ -Werte benutzt. Ein Kreis um das Zentrum mit Radius  $p_k$  wird von allen Strahlen mit Stoßparameter  $p_l \leq p_k$  geschnitten, Schnittpunkt ist einer der diskreten Punkte  $z_m$  auf dem Strahl und zwar der mit dem Index  $m = k + 1 - l$ , der von  $m = 1$  bei  $l = k$  bis  $m = k$  bei  $l = 1$  läuft. Der Winkel, den der Strahl am Punkt  $z_m$  mit der vom Zentrum radial auswärts gerichteten Richtung einschließt (s. Gleichung (A.27)) ist

$$\mu_m = \cos \theta_m = \pm \sqrt{1 - \left( \frac{p_{k+1-l}^2}{p_l^2} \right)^2}. \quad (\text{A.29})$$

Die Winkel sind um  $\theta = \pi/2$  bzw.  $\mu = 0$  symmetrisch verteilt: die aus- bzw. einwärts gerichteten Intensitäten gehören dabei zu positiven bzw. negativen  $\mu$ -Werten.

Im Abstand  $p_k$  vom Zentrum ergeben sich also folgende Beziehungen für die Strahlungsmomente:

$$J(p_k) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^k a_m \left( I_{k+1-m,m}^+ + I_{k+1-m,m}^- \right) \quad (\text{A.30})$$

$$H(p_k) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^k b_m \mu_m \left( I_{k+1-m,m}^+ - I_{k+1-m,m}^- \right) \quad (\text{A.31})$$

$$K(p_k) = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^k c_m \mu_m^2 \left( I_{k+1-m,m}^+ + I_{k+1-m,m}^- \right) \quad (\text{A.32})$$

Wird obige Integration mit Hilfe der Trapezregel ausgeführt, gilt für die Integrationsgewichte

$$a_m = b_m = c_m = \begin{cases} \frac{1}{2} (\mu_2 - \mu_1) & \text{für } m = 1 \\ \frac{1}{2} (\mu_{m+1} - \mu_{m-1}) & \text{für } 1 < m < k \\ \frac{1}{2} (\mu_m - \mu_{m-1}) & \text{für } m = k \end{cases} \quad (\text{A.33})$$



## ANHANG A. NUMERISCHE LÖSUNG DER STRAHLUNGSTRANSPORTGLEICHUNG

---

Die Integrationsgewichte können auch aus bestimmten Bedingungen an  $I^\pm$  und geometrischen Überlegungen für verschiedene Strahlenverläufe berechnet werden (siehe Abbildung A.2).

Schließlich wird der Eddingtonfaktor aus dem Verhältnis vom zweiten zum nullten Strahlungsmoment berechnet:

$$f_{\text{Edd}}(p_k) := \frac{K(p_k)}{J(p_k)}. \quad (\text{A.34})$$

case	condition	a	b	c
1	$k = 1$	$\frac{2p_2^2}{3r_j^2} \left( \frac{1}{2} + \mu_1 \right) / (\mu_1 + 1)^2$	$\frac{p_2^2}{4r_j^2}$	$\frac{4p_2^2}{15r_j^2} \left( \frac{3/4 + \mu_1}{(1 + \mu_1)^2} + \frac{\mu_1}{2} \right)$ $\mu_1 = (1 - p_2^2 / r_j^2)^{1/2}$
2	$k = 2$	$\frac{p_2^2}{3r_j^2} (2 + \mu_1) / (\mu_1 + 1)^2$ $+ \frac{p_3^2 - p_2^2}{2r_j^2} \left( \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} \right)$	$\frac{p_2^2}{4r_j^2}$ $+ \frac{p_3^2 - p_2^2}{6r_j^2} \left( 1 + \frac{\mu_1}{\mu_1 + \mu_2} \right)$	$\frac{p_2^2}{15r_j^2} \left( \frac{2 + \mu_1}{(1 + \mu_1)^2} + 3\mu_1 \right)$ $+ \frac{p_3^2 - p_2^2}{12r_j^2} \left( \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{\mu_1 + \mu_2} + 2\mu_1 \right)$ $\mu_1 = (1 - p_2^2 / r_j^2)^{1/2}$ $\mu_2 = (1 - p_3^2 / r_j^2)^{1/2}$
3	$3 \leq k \leq K - 2$ and $r_j > p_{k+1}$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{2r_j^2} \left( \frac{1}{\mu_0 + \mu_1} \right)$ $+ \frac{p_{k+1}^2 - p_k^2}{2r_j^2} \left( \frac{1}{\mu_1 + \mu_2} \right)$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{6r_j^2} \left( 1 + \frac{\mu_1}{\mu_0 + \mu_1} \right)$ $+ \frac{p_{k+1}^2 - p_k^2}{6r_j^2} \left( 1 + \frac{\mu_1}{\mu_1 + \mu_2} \right)$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{12r_j^2} \left( \frac{\mu_0^2 + \mu_1^2}{\mu_0 + \mu_1} + 2\mu_1 \right)$ $+ \frac{p_{k+1}^2 - p_k^2}{12r_j^2} \left( \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2}{\mu_1 + \mu_2} + 2\mu_1 \right)$ $\mu_0 = (1 - p_{k-1}^2 / r_j^2)^{1/2}$ $\mu_1 = (1 - p_k^2 / r_j^2)^{1/2}$ $\mu_2 = (1 - p_{k+1}^2 / r_j^2)^{1/2}$
4	$r_j \leq p_{k+1}$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{2r_j^2} \left( \frac{1}{\mu_0 + \mu_1} \right)$ $+ \mu_1 / 3$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{6r_j^2} \left( 1 + \frac{\mu_1}{\mu_0 + \mu_1} \right)$ $+ \mu_1^2 / 3$	$\frac{p_k^2 - p_{k-1}^2}{12r_j^2} \left( \frac{\mu_0^2 + \mu_1^2}{\mu_0 + \mu_1} + 2\mu_1 \right)$ $+ \mu_1^3 / 5$ $\mu_0 = (1 - p_{k-1}^2 / r_j^2)^{1/2}$ $\mu_1 = (1 - p_k^2 / r_j^2)^{1/2}$
5	$r_j = p_k$	$\frac{2\mu_0}{3}$	0	$\frac{2\mu_0^3}{15}$ $\mu_0 = (1 - p_{k-1}^2 / r_j^2)^{1/2}$
6	$r_j \neq p_k$ for all k	$\frac{2\mu_0}{3}$	0	$\frac{2\mu_0^3}{15}$ $\mu_0 = (1 - p_{k-1}^2 / r_j^2)^{1/2}$

Abbildung A.3: Integrationsgewichte zur Bestimmung der Strahlungsmomente nach Gleichung (A.30) bis (A.32) aus Yorke [71].

# Anhang B

## Das chemische Netzwerk

In diesem Anhang werden die Reaktionen, die das chemische Ratennetzwerk bilden, aufgelistet.

### Wasserstoffchemie

Es ist eine Unterscheidung zwischen Ortho- und Para-H<sub>2</sub>, vorgesehen, die aber nicht benutzt wird<sup>1</sup>; stattdessen geht die Annahme, dass das ortho- zu para-Verhältnis über die gesamte Rechnung 3:1 beträgt.

In Tabelle B.1 ist das in dieser Arbeit implementierte chemische Ratennetzwerk aufgelistet. Die Quellenangabe bezieht sich auf folgende Publikationen: BCL: Bromm, Coppi, Larson [9], PUY: Puy et al. [48], PSS: Palla, Salpeter, Stahler [43] SLD: Stancil, Lepp, Dalgarno [58], [59] und LSD: Lepp, Stancil, Dalgarno [32]

Tabelle B.1: Das chemische Netzwerk.

Reaktion	Ratenkoeffizienten				Quelle
	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	
$\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{e}^-$	5.850E-11	5.000E-01	-1.578E+05	5.000E-01	BCL5
$\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \gamma$	8.400E-11	-5.000E-01	0.000E+00	7.000E-01	BCL6
$\text{H} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}^- + \gamma$	3.000E-16	1.000E+00	0.000E+00		PUY
$\text{H}^- + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$	9.750E-10	0.000E+00	0.000E+00		BCL
$\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H} + \text{H}$	7.000E-07	-5.000E-01	0.000E+00		BCL
$\text{H}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}^-$	2.700E-08	-1.500E+00	-4.300E+04		BCL
$\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	6.500E-07	-5.000E-01	-5.200E+04	-6.000E+03	PSS
$\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{H}$	2.400E-09	0.000E+00	-2.120E+04		BCL
$\text{H}_2 + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{e}^-$	4.380E-10	0.000E+00	-1.020E+05	3.500E-01	BCL9
$\text{H}^- + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{e}^- + \text{e}^-$	4.000E-12	1.000E+00	-8.750E+03		BCL
$\text{H}^- + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{e}^-$	5.300E-20	1.000E+00	-8.750E+03		BCL

*Fortsetzung auf der nächsten Seite*

<sup>1</sup>In Abschnitt 3.5 wird beschrieben, wie sich das Ortho- zu Para-Verhältnis von H<sub>2</sub> auf die thermischen Eigenschaften des Gases auswirken kann, wenn die Kühlung des Gases nicht wie in dieser Arbeit über die Opazität, sondern über Heiz- und Kühlfunktionen berechnet wird.

---

*Das chemische Netzwerk, Fortsetzung*

---

Reaktion	Ratenkoeffizienten				Quelle
	A	B	C	D	
$\text{H}^- + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$	8.830E-15	-3.200E-01	0.000E+00		PUY
$\text{H} + \text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	4.125E-29	-1.000E+00	0.000E+00		PSS
$\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}_2$	5.156E-30	-1.000E+00	0.000E+00		PSS
$\text{H}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$	8.125E-08	-5.000E-01	-5.200E+04	-6.000E+03	PSS
$\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^- + \text{H}$	9.860E-15	5.000E-01	-1.580E+05		PSS
$\text{H} + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}^-$	1.125E-09	-1.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}$	4.000E-08	-5.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}^- + \gamma \rightarrow \text{H} + \text{e}^-$	2.080E+04	2.130E+00	8.820E+03		LSDi
$\text{H}_2^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H}$	1.200E-08	-4.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	1.050E-07	-5.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{H}$	2.240E-09	4.200E-02	4.660E+04		SLD
$\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H}$	4.000E-08	-5.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}_3^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	1.600E-07	-5.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H} + \gamma \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$	1.400E+07	9.800E-01	1.570E+05		LSDi
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_3^+ + \text{e}^-$	2.700E-10	-4.480E-01	3.120E+04		LSD
$\text{H}^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2^+ + \text{e}^-$	1.000E-09	-4.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{H}$	1.400E-07	-5.000E-01	0.000E+00		SLD
$\text{H}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{H}_3^+ + \gamma$	1.000E-20	0.000E+00	0.000E+00		SLD
$\text{H}_2^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}_3^+ + \gamma$	1.500E-17	1.800E+00	-2.000E+01		SLDi
$\text{H}_3^+ + \text{H}^- \rightarrow \text{H}_2 + \text{H} + \text{H}$	1.725E-07	-5.000E-01	0.000E+00		SLD

---

Die Einheit des Ratenkoeffizienten  $k$  ist  $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$  bzw.  $\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$  bei Dreiteilchenreaktionen.

Die Ratenkoeffizienten haben eine je nach Quelle leicht unterschiedliche Form,  $T$  ist stets die Gastemperatur in Kelvin. In Bromm, Coppi, Larson (BCL) [9] wird  $k$  folgendermaßen berechnet:

$$k_{\text{BCL}} = A \cdot T^B \exp\left(\frac{C}{T}\right)$$

$$k_{\text{BCL5}} = A \cdot T^B \exp\left(\frac{C}{T}\right) \cdot \left(1 + \left(\frac{T}{10^5}\right)^D\right)^{-1}$$

$$k_{\text{BCL6}} = A \cdot T^B \exp\left(\frac{C}{T}\right) \cdot \left(1 + \left(\frac{T}{10^6}\right)^D\right)^{-1} \cdot (T/10^3)^{-0,2}$$

$$k_{\text{BCL9}} = A \cdot T^B \exp\left(\frac{C}{T}\right) \cdot T^D$$

Die Ratenkoeffizienten aus Puy et al. [48], Palla, Salpeter, Stahler [43] (PSS) Stancil, Lepp, Dalgarno [58], [59] (SLD) und Lepp, Stancil, Dalgarno [32] (LSD) lauten folgen-

dermaßen:

$$\begin{aligned}
 k_{\text{PUY}} &= A \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right) \\
 k_{\text{PSS}} &= A \cdot T^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{D}{T}\right)\right) \\
 k_{\text{SLD,LSD}} &= A \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^B \exp\left(-\frac{T}{C}\right) \\
 k_{\text{SLDi,LSDi}} &= A \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^B \exp\left(-\frac{C}{T}\right)
 \end{aligned}$$

---

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung einer kollabierenden Wolke (aus Larson [29]). . . . .	14
1.2	Entwicklungsphasen einer protostellaren Wolke (aus Omukai & Nishi [42]).	17
1.3	Struktur einer primordialen protostellaren Wolke während des Kollapses, aus Ripamonti et al. [50]. . . . .	20
2.1	Rosseland- und Planckmittel der PopIII-Opazität aus Mayer [35]. . . . .	30
2.2	Rosselandmittel der Opazität für die primordiale Gasmischung nach Mayer [35]. . . . .	32
2.3	Planckmittel der Opazität für die primordiale Gasmischung nach Mayer [35]. . . . .	33
2.4	Rosselandmittel der Opazität für Pop I- Gasmischung nach Gleichung (2.14). . . . .	34
3.1	Spektrum zur Bestimmung der primordialen Deuteriumhäufigkeit (aus Linsky et al. [33]). . . . .	40
3.2	Extrapolation zur Bestimmung der primordialen Heliumhäufigkeit (aus Izotov & Thuan [26]). . . . .	42
3.3	Häufigkeiten von $^4\text{He}$ , D, $^3\text{He}$ und $^7\text{Li}$ (aus Coc et al. [10]). . . . .	44
3.4	Entwicklung der H-, D-He- und Li-haltigen Spezies im frühen Universum (aus Galli & Palla [20]). . . . .	49
3.5	Energieniveaus eines Moleküls . . . . .	56
3.6	Kühlfunktion pro Molekül ( $\text{H}_2$ , HD, LiH und $\text{H}_2^+$ ) (aus Galli & Palla [20]).	57
4.1	Gestaffeltes Gitter . . . . .	63
4.2	Auseinanderlaufen der inneren Gitterpunkte bei einer Kollapstestrechnung.	70
5.1	Temperatur in Abhängigkeit der Rotverschiebung (aus Flower et al. [19]).	78
5.2	Jeansmasse bei konstanter Temperatur als Funktion der Dichte. . . . .	79

## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

---

6.1	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit konstanter Opazität: Strukturgrößen. . . . .	90
6.2	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit konstanter Opazität; Protostern: HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	91
6.3	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit konstanter Opazität; hydrostatischer Kern: HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	92
6.4	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit PopI-Opazität: Strukturgrößen. . . . .	93
6.5	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit PopI-Opazität: Staubhülle. HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	94
6.6	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit PopI-Opazität: Protostern und hydrostatischer Kern. HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	95
6.7	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit PopIII-Opazität: Strukturgrößen. . . . .	97
6.8	Modellrechnung ohne chemisches Netzwerk mit PopIII-Opazität; Protostern und hydrostatischer Kern: HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	98
6.9	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, unterschiedliche Opazität.	100
6.10	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, konstanter Opazität und Anfangstemperatur, unterschiedlicher Anfangsdichte. . . . .	101
6.11	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, PopI-Opazität und konstanter Anfangstemperatur, unterschiedlicher Anfangsdichte. . . . .	102
6.12	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, PopIII-Opazität und konstanter Anfangstemperatur, unterschiedlicher Anfangsdichte. . . . .	103
6.13	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, konstanter Opazität und Anfangsdichte, unterschiedlicher Anfangstemperatur. . . . .	104
6.14	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, PopI-Opazität, konstanter Anfangsdichte und unterschiedlicher Anfangstemperatur. . . . .	105
6.15	Modellrechnungen ohne chemisches Netzwerk, PopIII-Opazität, konstanter Anfangsdichte und unterschiedlicher Anfangstemperatur. . . . .	106
6.16	Zentraltemperatur gegen Zentraldichte. . . . .	112
6.17	Vergleich der Einfallgeschwindigkeiten. . . . .	115
6.18	Endzustand der Modellrechnungen: Konzentrationen, Temperatur, Masse.	116
6.19	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopI-Opazität: Strukturgrößen. . . . .	120
6.20	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopI-Opazität: Staubhülle. HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	121



6.21	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopI-Opazität: Protostern. HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	122
6.22	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopI-Opazität: zeitliche Entwicklung der Wasserstoffspezies. . . . .	123
6.23	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopIII-Opazität: Strukturgrößen. . . . .	124
6.24	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopIII-Opazität: Protostern. HR-Diagramm, Leuchtkraft, Masse, Radius. . . . .	125
6.25	Modellrechnung mit chemischem Netzwerk und PopIII-Opazität: zeitliche Entwicklung der Wasserstoffspezies. . . . .	126
6.26	Massenakkretion Modelle einschließlich chemischer Entwicklung . . . . .	128
6.27	Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk, Vergleich PopI- und PopIII-Opazität. . . . .	130
6.28	Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk, PopI-Opazität und konstanter Anfangstemperatur, unterschiedlicher Anfangsdichte. . . . .	131
6.29	Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk, PopIII-Opazität und konstanter Anfangstemperatur, unterschiedlicher Anfangsdichte. . . . .	132
6.30	Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk, PopI-Opazität und konstanter Anfangsteildichte, unterschiedlicher Anfangstemperatur. . . . .	134
6.31	Modellrechnungen mit chemischem Netzwerk, PopIII-Opazität und konstanter Anfangsteildichte, unterschiedlicher Anfangstemperatur. . . . .	135
6.32	Modellrechnung mit PopI-Opazität: unterschiedliche chemische Anfangszusammensetzung. . . . .	139
6.33	Modellrechnung mit PopIII-Opazität: unterschiedliche chemische Anfangszusammensetzung. . . . .	140
A.1	Darstellung der $pz$ -Ebene. . . . .	146
A.2	Darstellung der $pz$ -Ebene $\mu$ -Integration aus Yorke [71]. . . . .	150
A.3	Integrationsgewichte zur Bestimmung der Strahlungsmomente aus Yorke [71]. . . . .	152



# Tabellenverzeichnis

3.1	Anfangswerte der Konzentrationen der chemischen Spezies in den Modellrechnungen der vorliegenden Arbeit. . . . .	54
5.1	Jeansmasse $M_J(n, T)$ . . . . .	79
6.1	Ergebnisse der Modellrechnungen; Massen, Radien, Alter . . . . .	88
6.2	Das chemische Netzwerk . . . . .	109
B.1	Das chemische Netzwerk . . . . .	153

## TABELLENVERZEICHNIS

---

# Literaturverzeichnis

- [1] T. Abel, P. Anninos, M. L. Norman, and Y. Zhang. First Structure Formation. I. Primordial Star-forming Regions in Hierarchical Models. *The Astrophysical Journal*, 508:518–529, December 1998.
- [2] T. Abel, G. L. Bryan, and M. L. Norman. The Formation and Fragmentation of Primordial Molecular Clouds. *The Astrophysical Journal*, 540:39–44, September 2000.
- [3] T. Abel, G. L. Bryan, and M. L. Norman. The Formation of the First Star in the Universe. *Science*, 295:93–98, January 2002.
- [4] N. R. Badnell, M. A. Bautista, K. Butler, F. Delahaye, C. Mendoza, P. Palmeri, C. J. Zeippen, and M. J. Seaton. Updated opacities from the Opacity Project. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 360:458–464, June 2005.
- [5] R. Banerjee and R. E. Pudritz. Massive Star Formation via High Accretion Rates and Early Disk-driven Outflows. *The Astrophysical Journal*, 660:479–488, May 2007.
- [6] R. Banerjee, R. E. Pudritz, and D. W. Anderson. Supersonic turbulence, filamentary accretion and the rapid assembly of massive stars and discs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 373:1091–1106, December 2006.
- [7] K. R. Bell and D. N. C. Lin. Using FU Orionis outbursts to constrain self-regulated protostellar disk models. *The Astrophysical Journal*, 427:987–1004, June 1994.
- [8] V. Bromm, P. S. Coppi, and R. B. Larson. Forming the First Stars in the Universe: The Fragmentation of Primordial Gas. *The Astrophysical Journal Letters*, 527:L5–L8, December 1999.
- [9] V. Bromm, P. S. Coppi, and R. B. Larson. The Formation of the First Stars. I. The Primordial Star-forming Cloud. *The Astrophysical Journal*, 564:23–51, January 2002.
- [10] A. Coc, E. Vangioni-Flam, P. Descouvemont, A. Adahchour, and C. Angulo. Updated Big Bang Nucleosynthesis Compared with Wilkinson Microwave Anisotropy Probe Observations and the Abundance of Light Elements. *The Astrophysical Journal*, 600:544–552, January 2004.
- [11] Collaborative Computational Project. <http://ccp7.dur.ac.uk/>.

- [12] A. Dalgarno. Molecular processes in the early Universe. *Journal of Physics Conference Series*, 4:10–16, January 2005.
- [13] E. A. Dorfi and L. O’C Drury. Simple adaptive grids for 1D initial value problems. *MPI H - 1985 V 21*, 1985.
- [14] Dorfi, E. A. Radiation Hydrodynamics: Numerical Aspects and Applications. In LeVeque, R. J. and Mihalas, D. and Dorfi, E. A. and Müller, E., editor, *Computational Methods for Astrophysical Fluid Flow*. Springer Verlag, 1997. Saas-Fee Advanced Course 27.
- [15] Ehrig, R. and Nowak, U. *LIMEX version 4.3B*. Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), URL: <http://www.zib.de>, <http://www.zib.de/ehrig/software.html>, e-mail: [ehrig@zib.de](mailto:ehrig@zib.de), [nowak@zib.de](mailto:nowak@zib.de), 2002.
- [16] J. J. Eldridge and C. A. Tout. A more detailed look at the opacities for enriched carbon and oxygen mixtures. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 348:201–206, February 2004.
- [17] B. D. Fields. On the Evolution of the Light Elements. I. D,  $^3\text{He}$ , and  $^4\text{He}$ . *The Astrophysical Journal*, 456:478–498, January 1996.
- [18] D. R. Flower, J. Le Bourlot, G. Pineau des Forêts, and E. Roueff. The cooling of astrophysical media by HD. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 314:753–758, June 2000.
- [19] D. R. Flower and G. Pineau des Forêts. The ortho:para  $\text{H}_2$  ratio in the primordial gas. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 316:901–905, August 2000.
- [20] D. Galli and F. Palla. The chemistry of the early Universe. *Astronomy & Astrophysics*, 335:403–420, July 1998.
- [21] S. C. Glover. Chemistry and cooling in metal-free and metal-poor gas. *arXiv:0708.3086v2*, 2007. <http://arxiv.org/>.
- [22] S. C. Glover, D. W. Savin, and A.-K. Jappsen. Cosmological Implications of the Uncertainty in  $\text{H}^-$  Destruction Rate Coefficients. *The Astrophysical Journal*, 640:553–568, April 2006.
- [23] R. M. Hutchings, F. Santoro, P. A. Thomas, and H. M. P. Couchman. How big were the first cosmological objects? *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 330:927–936, March 2002.
- [24] C. A. Iglesias and F. J. Rogers. OPAL opacities for astrophysical applications. In *Presented at the International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter, Sarasota, FL, 22-26 Oct. 1990*, pages 22–26, May 1991.
- [25] C. A. Iglesias and F. J. Rogers. Updated Opal Opacities. *The Astrophysical Journal*, 464:943–953, June 1996.

- 
- [26] Y. I. Izotov and T. X. Thuan. The Primordial Abundance of  $4\text{He}$  Revisited. *The Astrophysical Journal*, 500:188–216, June 1998.
- [27] T. Karlsson, J. L. Johnson, and V. Bromm. Uncovering the Chemical Signature of the First Stars in the Universe. *astro-ph/0709.4025v1*, 2007. <http://arxiv.org/>.
- [28] A. Kashlinsky, R. G. Arendt, J. Mather, and S. H. Moseley. Tracing the first stars with fluctuations of the cosmic infrared background. *Nature*, 348:45–50, November 2005.
- [29] R. B. Larson. Numerical calculations of the dynamics of collapsing proto-star. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 145:271–295, 1969.
- [30] J. Le Bourlot, G. Pineau des Forêts, and D. R. Flower. The cooling of astrophysical media by  $\text{H}_2$ . *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 305:802–810, May 1999.
- [31] P. Lenzuni, D. F. Chernoff, and E. E. Salpeter. Rosseland and Planck mean opacities of a zero-metallicity gas. *The Astrophysical Journal Supplement*, 76:759–801, June 1991.
- [32] S. Lepp, P. C. Stancil, and A. Dalgarno. TOPICAL REVIEW: Atomic and molecular processes in the early Universe. *Journal of Physics B Atomic Molecular Physics*, 35:57–80, May 2002.
- [33] J. L. Linsky, A. Brown, K. Gayley, A. Diplas, B. D. Savage, T. R. Ayres, W. Landsman, S. N. Shore, and S. R. Heap. Goddard high-resolution spectrograph observations of the local interstellar medium and the deuterium/hydrogen ratio along the line of sight toward Capella. *The Astrophysical Journal*, 402:694–709, January 1993.
- [34] A. Loeb and F. A. Rasio. Collapse of primordial gas clouds and the formation of quasar black holes. *The Astrophysical Journal*, 432:52–61, September 1994.
- [35] M. Mayer. Die Absorptionseigenschaften primordialier Materie und ihre Anwendung auf die Struktur und Stabilität stationärer Akkretionsscheiben  
The absorption properties of primordial matter and their application to the structure and stability of stationary accretion discs. *Ph.D. Thesis*, December 2004.
- [36] M. R. C. McDowell. On the formation of  $\text{H}_2$  in H I regions. *The Observatory*, 81:240–243, December 1961.
- [37] F. Nakamura and M. Umemura. On the Mass of Population III Stars. *The Astrophysical Journal*, 515:239–248, April 1999.
- [38] F. Nakamura and M. Umemura. On the Initial Mass Function of Population III Stars. *The Astrophysical Journal*, 548:19–32, February 2001.
- [39] F. Nakamura and M. Umemura. The Stellar Initial Mass Function in Primordial Galaxies. *The Astrophysical Journal*, 569:549–557, April 2002.

- [40] M. L. Norman, T. Abel, and G. Bryan. First Structure Formation and the First Stars. In A. Weiss, T. G. Abel, and V. Hill, editors, *The First Stars: Proceedings of the MPA/ESO Workshop Held at Garching, Germany, 4-6 August 1999, ESO ASTROPHYSICS SYMPOSIA. ISBN 3-540-67222-2. Edited by A. Weiss, T.G. Abel, and V. Hill. Springer-Verlag, 2000, p. 250*, 2000.
- [41] Nowak, U. Adaptive Linienmethoden für nichtlineare parabolische Systeme in einer Raumdimension. Technical Report 1993 Technical Report 93-14, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB), URL: <http://www.zib.de>, 1993.
- [42] K. Omukai and R. Nishi. Formation of Primordial Protostars. *The Astrophysical Journal*, 508:141–150, November 1998.
- [43] F. Palla, E. E. Salpeter, and S. W. Stahler. Primordial star formation - The role of molecular hydrogen. *The Astrophysical Journal*, 271:632–641, August 1983.
- [44] M. V. Penston. Dynamics of self-gravitating gaseous spheres-II. Collapses of gas spheres with cooling and the behaviour of polytropic gas spheres. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 145:457–485, 1969.
- [45] A. A. Penzias and R. W. Wilson. A Measurement of Excess Antenna Temperature at 4080 Mc/s. *The Astrophysical Journal*, 142:419–421, July 1965.
- [46] L. S. Pilyugin. On the Evolution of Helium Nitrogen and Oxygen Abundances in Dwarf Irregular Galaxies. *Astronomy & Astrophysics*, 277:42–52, September 1993.
- [47] M. PułECKA, M. R. Schmidt, V. I. Shematovich, and R. Szczerba. Self-consistent treatment of dynamics and chemistry in the winds from carbon-rich AGB stars. I. Tests of the equilibrium and kinetic chemical codes. *Astronomy & Astrophysics*, 469:553–560, July 2007.
- [48] D. Puy, G. Alecian, J. Le Bourlot, J. Leorat, and G. Pineau Des Forets. Formation of primordial molecules and thermal balance in the early universe. *Astronomy & Astrophysics*, 267:337–346, January 1993.
- [49] D. Puy and M. Signore. Primordial molecules in the early cloud formation. *Astronomy & Astrophysics*, 305:371–378, January 1996.
- [50] E. Ripamonti, F. Haardt, A. Ferrara, and M. Colpi. Radiation from the first forming stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 334:401–418, August 2002.
- [51] F. J. Rogers and C. A. Iglesias. Radiative atomic Rosseland mean opacity tables. *The Astrophysical Journal Supplement*, 79:507–568, April 1992.
- [52] D. Saumon, G. Chabrier, and H. M. van Horn. An Equation of State for Low-Mass Stars and Giant Planets. *The Astrophysical Journal Supplement*, 99:713–741, August 1995.
- [53] F. H. Shu. Self-similar collapse of isothermal spheres and star formation. *The Astrophysical Journal*, 214:488–497, June 1977.



- 
- [54] L. Siess, M. Livio, and J. Lattanzio. Structure, Evolution, and Nucleosynthesis of Primordial Stars. *The Astrophysical Journal*, 570:329–343, May 2002.
- [55] A. Songaila, L. L. Cowie, C. J. Hogan, and M. Rugers. Deuterium Abundance and Background Radiation Temperature in High Redshift Primordial Clouds. *Nature*, 368:599–604, April 1994.
- [56] D. N. Spergel, L. Verde, H. V. Peiris, E. Komatsu, M. R. Nolta, C. L. Bennett, M. Halpern, G. Hinshaw, N. Jarosik, A. Kogut, M. Limon, S. S. Meyer, L. Page, G. S. Tucker, J. L. Weiland, E. Wollack, and E. L. Wright. First-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Determination of Cosmological Parameters. *The Astrophysical Journal Supplement*, 148:175–194, September 2003.
- [57] F. Spite and M. Spite. Abundance of lithium in unevolved halo stars and old disk stars - Interpretation and consequences. *Astronomy & Astrophysics*, 115:357–366, November 1982.
- [58] P. C. Stancil, S. Lepp, and A. Dalgarno. The Lithium Chemistry of the Early Universe. *The Astrophysical Journal*, 458:401–406, February 1996.
- [59] P. C. Stancil, S. Lepp, and A. Dalgarno. The Deuterium Chemistry of the Early Universe. *The Astrophysical Journal*, 509:1–10, December 1998.
- [60] C. W. Straka. *Thermonukleares Brennen und Mischen mit einer zeitabhängigen Konvektionstheorie in massereichen Population-III-Sternen*. PhD thesis, Universität Heidelberg, 2002.
- [61] M. Tegmark, J. Silk, M. J. Rees, A. Blanchard, T. Abel, and F. Palla. How Small Were the First Cosmological Objects? *The Astrophysical Journal*, 474:1–12, January 1997.
- [62] T. X. Thuan, Y. I. Izotov, and V. A. Lipovetsky. Heavy element abundances in a new sample of low-metallicity blue compact galaxies. *The Astrophysical Journal*, 445:108–123, May 1995.
- [63] W. M. Tscharnuter and K.-H. Winkler. A method for computing selfgravitating gas flows with radiation. *Computer Physics Communications*, 18:171–199, October 1979.
- [64] D. Tytler, X.-M. Fan, and S. Burles. Cosmological baryon density derived from the deuterium abundance at redshift  $Z = 3.57$ . *Nature*, 381:207–209, 1996.
- [65] Unsöld, A. and Baschek, B. *Der Neue Kosmos*. Springer Verlag, 1999.
- [66] E. Vangioni-Flam, A. Coc, and M. Cassé. Big bang nucleosynthesis updated with the NACRE compilation. *Astronomy & Astrophysics*, 360:15–23, August 2000.
- [67] J. von Neumann and R. D. Richtmyer. A Method for the Numerical Calculation of Hydrodynamic Shocks. *Journal of Applied Physics*, 21:232–237, March 1950.

## LITERATURVERZEICHNIS

---

- [68] R. V. Wagoner. Big-Bang Nucleosynthesis Revisited. *The Astrophysical Journal*, 179:343–360, January 1973.
- [69] D. P. Woody and P. L. Richards. Spectrum of the cosmic background radiation. *Physical Review Letters*, 42:925–929, April 1979.
- [70] G. Wuchterl and W. M. Tscharnuter. From clouds to stars. Protostellar collapse and the evolution to the pre-main sequence I. Equations and evolution in the Hertzsprung-Russell diagram. *Astronomy & Astrophysics*, 398:1081–1090, February 2003.
- [71] H. W. Yorke. Numerical solution of the equation of radiation transfer in spherical geometry. *Astronomy & Astrophysics*, 86:286–294, June 1980.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, allen, die Zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen haben, meinen Dank auszusprechen.

Herrn Prof. Gail gilt nachdrücklich mein ganz besonderer Dank für die Betreuung dieser Arbeit. Er stand mit außerordentlicher Geduld jederzeit zur Verfügung und hat nicht nur dadurch diese Arbeit erst möglich gemacht.

Herrn Prof. Klessen danke ich für die Bereitschaft zu Erstellung des Zweitgutachtens und für die Bereitstellung eines Raumes am Ende der Arbeit.

Christian Straka danke ich für seine Hilfe mit dem Umgang mit LIMEX und für seine adf95-Routinen, Michael Mayer danke ich für die Bereitstellung seiner Opazitätstabellen nebst Interpolationsroutinen. Beide haben außerdem mit hilfreichen Anregungen und Tipps zu dieser Arbeit beigetragen.

Emanuel Ziegler, Tobias Illenseer, Dominikus Heinzeller und Michael Mayer haben stets dafür gesorgt, dass die Rechner am Institut problemlos funktionierten. Auch ihnen sei gedankt.

Farid Gamgami bin ich dankbar für konstruktive, teils ermutigende Gespräche und dafür, keiner Diskussion aus dem Weg gegangen zu sein. Matthias Bartelmann für sein offenes Ohr und die richtigen Worte zur richtigen Zeit.

Von großem Wert war die einzigartige Atmosphäre innerhalb des ITA, bei der immer ein freundlicher Ansprechpartner zu finden war.

Es gibt zahlreiche Leute, die direkt und indirekt zu dieser Arbeit beigetragen haben; sie alle namentlich zu erwähnen ist leider unmöglich.

Bei meiner Schwester Nicole bedanke ich mich herzlich für das Korrekturlesen eines Teils des Manuskriptes.

Zu tiefem Dank bin ich Irena Otašević verbunden, deren Unterstützung und Ermutigung, gerade in schwierigen Momenten, nicht nachließ.

Diese Arbeit wurde aus Mitteln des Sonderforschungsbereichs 439 der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziert.

