INAUGURAL-DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlich-Mathematischen Gesamtfakultät

der

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

vorgelegt von
Dipl.–Phys. Andrea S. Ferrarotti
aus Rosario/Argentinien

Tag der mündlichen Prüfung: 03.12.2003

Staubbildung in Sternwinden

Gutachter : Prof. Dr. Hans-Peter Gail
Prof. Dr.Wolfgang Krätschmer

Zusammenfassung

In der Endphase ihrer Entwicklung werden die meisten Sterne zu effizienten Staubproduzenten. Sterne kleiner oder mittlerer Masse (Anfangsmasse $M_* \leq 8M_\odot$) verlieren auf dem asymptotischen Riesenast (AGB) den Großteil ihrer Masse in einem massiven Sternwind und bilden optisch sehr dicke Staubhüllen. Der Staub spielt eine wichtige Rolle bei der Sternentstehung, da nur Staubpartikel eine effiziente Kühlung des Gases beim protostellaren Kollaps bewirken. Dadurch wirkt sich die Staubbildung direkt auf die Entstehung von Sternen und die weitere Entwicklung von Galaxien aus.

In dieser Arbeit wurden die Kondensationsprozesse von Staubpartikeln bei Massenverlustprozessen für Sterne mit unterschiedlichen Elementhäufigkeiten und Metallizitäten untersucht. Es wurde untersucht, wie die Staubbildung für S-Sterne abläuft. Es konnte gezeigt werden, dass bei S-Sternen FeSi, metallisches Eisen sowie geringe Mengen Forsterit und SiC auskondensieren.

Die Abhängigkeit der Zusammensetzung der Mineralmischung vom Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis in den Hüllen um Riesensterne vom Spektraltyp M wurde untersucht. Es zeigte sich, dass die Bildung von Quarz in magnesiumarmen Sternen ($\epsilon_{\rm Mg} \lesssim \epsilon_{\rm Si}$) erwartet werden kann und dass diese Staubkomponente durch charakteristische Spektraleigenschaften von Quarz in dem Infrarotspektrum der Staubhülle identifiziert werden kann.

Ferner wurde die Kondensation der Oxide von Fe und Mg sowie des Mischkristalls Magnesiowüstit ($\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{1-x-\delta}\mathrm{O}$) im Sternwind von AGB-Riesen und RGB- Überriesen mit sauerstoffreicher Elementmischung untersucht. Die Rechnungen zeigen, dass Magnesiowüstit ein wahrscheinliches Kondensat ist. Die berechnete Wellenlänge der Magnesiowüstitresonanz stimmt mit einem noch nicht identifiziertem Staubfeature überein, das in einigen sauerstoffreichen zirkumstellaren Staubhüllen entdeckt wurde.

Schließlich wurde mit Hilfe synthetischer AGB-Entwicklungen der Massenverlust auf dem AGB und die Staubproduktionsrate sowie die Menge des produzierten Staubs untersucht.

Abstract

During the final stages of their evolution most stars become efficient dust factories. On the Asymptotic Giant Branch (AGB) low or intermediate mass stars (initial mass $M_* \leq 8M_\odot$) loose most of their initial mass in a massive stellar wind and develop optically very thick dust shells. Dust is very important for stellar evolution since only dust particles cause efficient gas cooling during the protostellar collaps. Therefore dust formation influences directly the evolution of stars and further evolution of galaxies.

In this work condensation of dust grains were investigated under mass loss conditions for stars with different element abundances and metallicities. The process of dust formation for S stars were studied. It could be shown, that FeSi, metallic iron, and small quantities forsterit and SiC condense for S stars.

The dependence of composition of the mineral mixture from the Mg/Si abundance ratio in stellar shells around giant stars of spectral type M were investigated. It was found, that formation of quartz can be expected for magnesium poor stars ($\epsilon_{\rm Mg} \lesssim \epsilon_{\rm Si}$) and that this dust component can be identified by characteristic spectral features of quartz in the infrared spectrum of the dust shell.

Further the condensation of Fe and Mg oxide and of the solid solution magnesiowüstite ($\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{1-x-\delta}\mathrm{O}$) in the stellar wind of ABG giants and RGB supergiants with oxygen rich element mixture were studied. Calculations show, that magnesiowüstite is a likely condensate. The calculated wavelength of the magnesiowüstite resonance corresponds to a unidentified dust feature found in some oxygen rich circumstellar dust shells.

Finally mass loss on the AGB and dust formation rate as well as the quantities of dust produced by evolved stars were investigated via synthetic AGB evolutions.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung

Alle Sterne geben gegen Ende ihrer Lebensdauer einen Teil ihrer ursprünglichen Masse wieder an das interstellare Medium zurück. Es gibt drei mögliche Arten von Massenverlust:

- Verlust von Masse in Form eines langanhaltenden, stationären Sternwindes.
- Sporadische und unregelmäßige Ausbrüche, die über einen gewissen Zeitraum auftreten, und die zum Teil sehr stark sind.
- Explosiver Massenabwurf in Nova- oder Supernova-Ereignissen.

Aus dieser Materie, die an das interstellare Medium zurückgegeben wird, entstehen neue Sterne.

Die Rate dieses Massenverlustes hängt stark von der Leuchtkraft und von der Temperatur der Sternoberfläche ab.

Die Sternwinde sind bei heißen und kalten Sternen sehr unterschiedlich. Bei heißen Sternen ist das Windmaterial ionisiert. Die Windgeschwindigkeiten sind sehr hoch (einige 1000 km s^{-1}). Bei kühlen Sternen ist das Material kalt und neutral. Es besteht hauptsächlich aus molekularem Gas.

Die Ausströmgeschwindigkeit liegt typischerweise bei kühlen Sternen im Bereich von 10 km s^{-1} bis 20 km s^{-1} (Schönberner & Blöcker [1998]). bei allen diesen Objekten kühlt sich das Gas im Sternwind oder in einer abgeworfenen Massenschale während der Expansion langsam ab, bis bei Temperaturen um 1000 K die schweren Elemente aus der Gasphase als kleine Festkörperpartikelchen auskondensieren und bilden überwiegend optisch dicke Staubhüllen.

Mit der typischen Effektivtemperatur von $T_* = 3000$ K und $T(r_i) = T_c$ ergibt sich der innere Radius r_i der Staubhülle zu $r_i \approx 5R_*$. Der äu ere Radius ist die Position der Stoßfront, in der die Strömung des Sternwinds in das interstellare Medium übergeht. Die Außenkante liegt bei einem Radius $r_a > 10^{17}$cm. Die Staubteilchen sind dynamisch an das Gas angekoppelt. Sie absorbieren Photonen aus dem Sternlicht, wodurch sie deren Impuls aufnehmen. Damit wird auf die Teilchen eine auswärts gerichtete Kraft ausgeübt, der sog. Strahlungsdruck. Da die Abstrahlung der Staubteilchen im wesentlichen isotrop ist, verlieren diese durch die Emission im Mittel keinen Impuls. Im Endeffekt wird der Impuls gewinn durch Absorption der Staubteilchen durch Reibungskopplung auf das Gas übertragen. Bei leuchtkräftigen Sternen ist der Strahlungsdruck größer als die Schwereanziehung, sodass die Staubteilchen vom Stern wegbeschleunigt werden.

Sterbende Sterne sind die wichtigste Quelle für den interstellaren Staub, der zusammen mit dem interstellaren Gas den Raum zwischen den Sternen ausfüllt. Wenn in der interstellaren Materie gelegentlich dichte Wolken entstehen, bilden sich in diesen Wolken nach kurzer Zeit neue Sterne. Bei einem Teil dieser neuen Sterne entsteht zusammen mit dem Stern ein Planetensystem. Der interstellare Staub bildet dann das Rohmaterial, aus dem sich die neuen Planeten bilden. Unsere Erde, auf der wir leben, ist auf diese Weise durch Zusammenballung von kleinen Staubteilchen entstanden, die sich zum großen Teil ursprünglich einmal in den Hüllen anderer Sterne gebildet haben. Die heutige Erde läßt natürlich nichts mehr von der Zusammensetzung des ursprünglichen Staubs erkennen, da das Material durch tektonische Prozesse in der Zwischenzeit vielfach aufgeschmolzen und wieder erstarrt ist.

In dieser Arbeit werden die Prozesse, die zur Entstehung des Staubs in der Umgebung kühler Sterne oder in abgeworfenen Massenschalen führen, untersucht. Diese Prozesse sind bis heute erst teilweise verstanden, zum einen wegen der äußerst komplexen chemischen und physikalischen Vorgänge, die bei einer theoretischen Beschreibung und Modellierung zu berücksichtigen sind, zum anderen, weil erst der ISO Satellit während seiner Operationzeit 1995-1997 detaillierte Infrarotspektren aus dem für eine Festkörper-Spektroskopie besonder wichtigen Spektralbereich zwischen 20 und 180 μ-m geliefert hat, sodass erst jetzt fundierte Aussagen über die Staubhüllen, ihre Eigenschaften und die Zusammensetzung des Staubs in ihnen gewonnen werden können.

Diese Arbeite wird im Rahmen eines Projekts im Sonderforschungsbereich 439 *Galaxien im jungen Kosmos* durchgeführt. Hier geht es z.B. um die Frage, wann das erste Staubkorn im Kosmos entstanden ist. Diese Frage ist deswegen von besonderem Interesse, weil der Staub eine wichtige Rolle bei der Entstehung neuer Sterne spielt, da nur Staub eine effiziente Kühlung des Gases beim protostellaren Kollaps zu leisten vermag. Dadurch spielt der Staub eine wichtige Rolle bei der Entstehung von Sternen und der Entwicklung von Galaxien.

2. Sternentwicklung

Sterne bilden sich in einer großen interstellaren Molekülwolke. Die Entstehung beginnt, wenn ein kleiner Bereich instabil gegenüber einem gravitativen Kollaps wird. In den kollabierenden Wolkenfragmenten ensteht eine rasch wachsende zentrale Verdichtung. Wenn die zentrale Verdichtung optisch dick geworden ist, kommt es zu einem starken Anstieg von Temperatur und Gasdruck, der den Kollaps aufhalten kann.

Solche Protosterne bestehen aus einem kleinen heißen Kern und einer ausgedehnten, kalten Hülle. Sie liegen auf der rechten Seite des Hertzsprung-Russel-Diagramms (HRD), genauer auf der Hayashi-Linie. Dort erreichen die Sterne einen vollkonvektiven Aufbau. Wenn die zentralen Temperaturen groß genug für Wasserstoffbrennen geworden sind, erreicht der Protostern die Hauptreihe (*main sequence* oder MS). Sterne im hydrostatischen und thermischen Gleichgewicht mit Massen von etwa 0.08 bis etwa $120 M_\odot$ in der Phase des Kern-Wasserstoffbrennen bilden diese Linie im HRD. Sterne mit $M_* \leq 0.08 \mathrm{M}_\odot$ werden nie heiß genug, um das Wasserstoffbrennen zu zünden. Es resultiert dann also kein Hauptreihenstern mehr. Man nennt diese Objekte *Braune Zwerge*.

Die Hauptreihen-Phase ist die längste Phase der Sternentwicklung. Sie dauert um so länger, je kleiner die Sternmasse ist.

Der innere Aufbau der Hauptreihensterne erweist sich nach den Modellrechnungen als verschieden für die obere und die untere Hauptreihe. Sterne der oberen Hauptreihe mit $M > 1.5\ \mathrm{M}_\odot$ besitzen Zentraltemperaturen $T_0 > 2 \cdot 10^7$ K, sodass die Energieproduktion durch den CNO-Zyklus dominiert wird. Aufgrund der hohen Temperaturempfindlichkeit des CNO-Zyklus wird der Wasserstoff nur in einem kleinen Kerngebiet verbrannt. Dies erfordert beim Strahlungstransport einen sehr steilen Temperaturgradienten. Diese Sterne besitzen daher einen konvektiven Kern und eine radiative Hülle. Bei größerer Sternmasse ist die Ausdehnung des konvektiven Kerns größer.

Sterne der unteren Hauptreihe mit $M < 1.5\ \mathrm{M}_\odot$ besitzen Zentraltemperaturen $T_0 < 2 \cdot 10^7$ K. Die Energieerzeugung erfolgt daher vorwiegend durch die pp-Reaktionen. Die geringere Temperaturabhängigkeit erfordert einen kleineren Temperaturgradienten, sodass im Kerngebiet der Energietransport durch Strahlung erfolgt. In der Hülle existieren Zonen, in denen H partiell ionisiert ist. Dort ist der Temperaturgradient für Strahlungsgleichgewicht aufgrund der Zunahme der Opazität im Bereich der Ionisation groß und der adiabatische Temperaturgradient wegen der

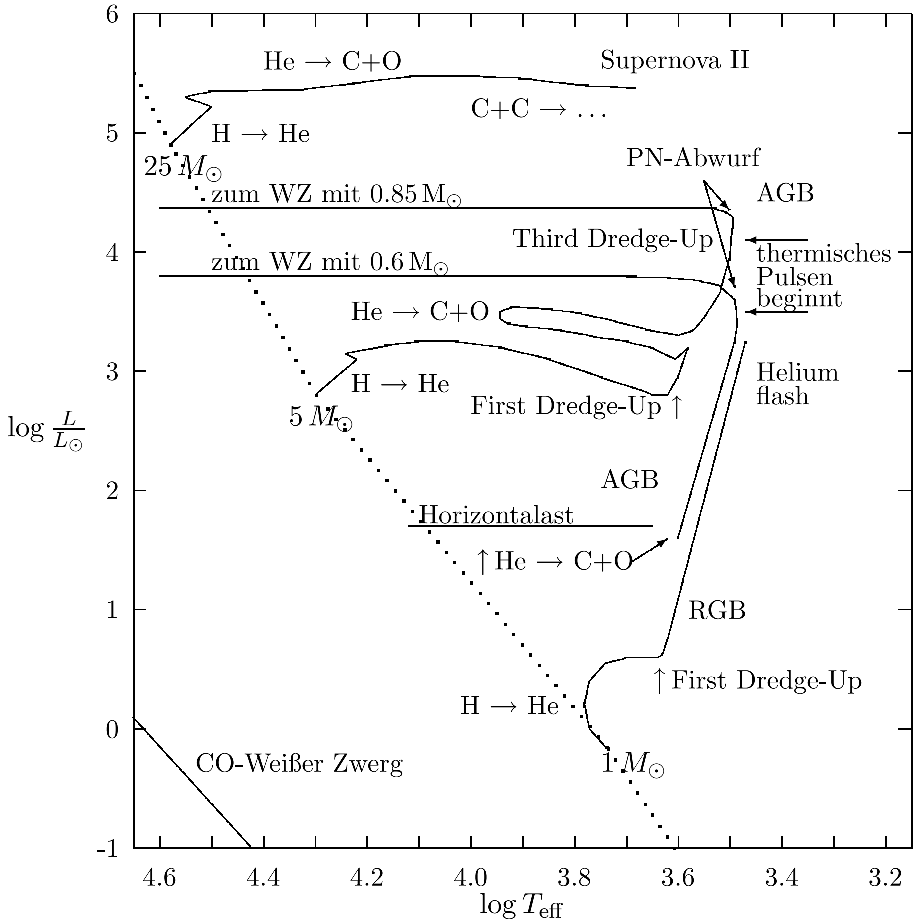

Abbildung 2.1 Nachhauptreihen-Entwicklung. Daten nach Iben Jr. [1991]

Ionisation klein. Es ergibt sich daher eine konvektive Hülle. Die Tiefe der Konvektionszone nimmt mit abnehmender effektiver Temperatur zu.

In der Hauptreihenphase wird langsam der gesamte Wasserstoff im Zentralgebiet des Sterns in Helium umgewandelt und verbraucht. Der Kern wird dichter und die äußere Hülle wird stark ausgedehnt. Der Wasserstoff beginnt in einer Schalenquelle über einem noch nicht entarteten Heliumkern zu brennen. Die Bewegung im HRD verläuft langsam zunächst etwas nach oben anschließen nach rechts. Der Stern wird heller und röter, er befindet sich dann auf dem Roten-Riesen Ast (RGB). Am unteren Ende des RGB reicht kurzfristig die konvektive, äußere Hülle in das Gebiet hinein, in dem bereits Wasserstoff nach dem CNO-Zyklus gebrannt hat. Dadurch werden die Brennprodukte an die Sternoberfläche gebracht. Dieser Mischungsprozess wird als *„first dredge up“* bezeichnet.

Die weitere Entwicklung hängt stark von der Sternmasse ab (s. Abb. 2.1).

2.1 Entwicklung von Sternen kleiner und mittlerer Masse

2.1.1 $M_* \leq 0.5M_\odot$

Bei diesen Sternen ist die Zentraltemperatur zu niedrig, um das Heliumbrennen zu zünden. Diesen Objekten steht nur die durch Kontraktion gewinnbare Gravitationsenergie zur Verfügung. Wegen ihrer langen Entwicklungszeit gibt es keine dieser Sterne auf dem RGB Ast. Sie befinden sich noch alle auf der Hauptreihe.

2.1.2 $0.5M_\odot \leq M_* \leq 2.3M_\odot$

Diese Sterne haben einen entarteten Heliumkern bevor die Temperatur für das Zünden des Heliumbrennens erreicht wird. Das Helium im Kern zündet also unter entarteten Bedingungen, was zu dem äußerst heftig verlaufenden *Heliumflash* führt. Er endet, wenn die Temperatur so hoch geworden ist, dass die Entartung aufgehoben wird. Dann befinden sie die Sterne auf den Horizontalast. Bei Sternen mit $M_* \leq 0.8M_\odot$ ist die Entwicklungszeit länger als das Alter des Kosmos, sodass es keine dieser Sterne gibt, die schon den RGB Ast erreicht haben. Diese Sterne bezeichnet man als *Sterne kleiner Masse*.

2.1.3 $2.3M_\odot \leq M_* \leq 8M_\odot$

Im Gegensatz zu den massenarmen Sternen haben diese Sterne genügend Masse, um das He-Brennen unter nicht-entarteten Bedingungen zu zünden. Diese Sterne bezeichnet man als *Sterne mittlerer Masse*. Nach Beginn des Heliumbrennens wird der Stern heißer und weniger leuchtkräftig, er bewegt sich im HRD nach links und abwärts. Diese Sterne befinden sich dann dicht beim RGB Ast.

Die Veränderung des inneren Aufbaus wird aus der Abb.(2.2) ersichtlich. Wenn der Wasserstoffvorrat im Zentrum des Sterns aufgebraucht ist, kontrahiert der nun aus Helium bestehende Kern auf der Kelvin-Helmholtz-Zeitskala. Dabei dehnt sich die Hülle aus und kühlt ab. Das Wasserstoffbrennen setzt sich fort in einer konzentrischen Kugelschale, die um den Heliumkern entsteht. Das Zentralgebiet erhitzt sich durch die Kontraktion so weit, bis das Heliumbrennen beginnt ($\approx 10^8$K). Wenn das Helium ausgebrannt ist, kontrahiert und entartet der Kern. Das Helium brennt in einer Schalenquelle über einem C-O-Kern, während die Wasserstoff Schalenquelle erlischt. Der Stern dehnt sich stark aus und wird kühl. Er befindet sich dann auf dem asymptotischen Riesenastes (*asymptotic giant branch:* AGB). Dieser ist der Ort im HRD aller Sterne, die Helium in einer Schalenquelle über dem C-O-Kern brennen. Rote Riesensterne haben eine riesig ausgedehnte, vollständig konvektive Hülle, die bis in die Nähe der Brennzone reicht.

Bei Sternen mit $M_* \geq 3.5M_\odot$ reicht kurzfristig die Konvektionszone in Bereiche, in denen Wasserstoff nach dem CNO-Zyklus gebrannt hat. Dann werden die Brennprodukte an die Sternoberfläche hochgemischt. Dieser Mischungsprozess wird als *„second dredge up“* bezeichnet.

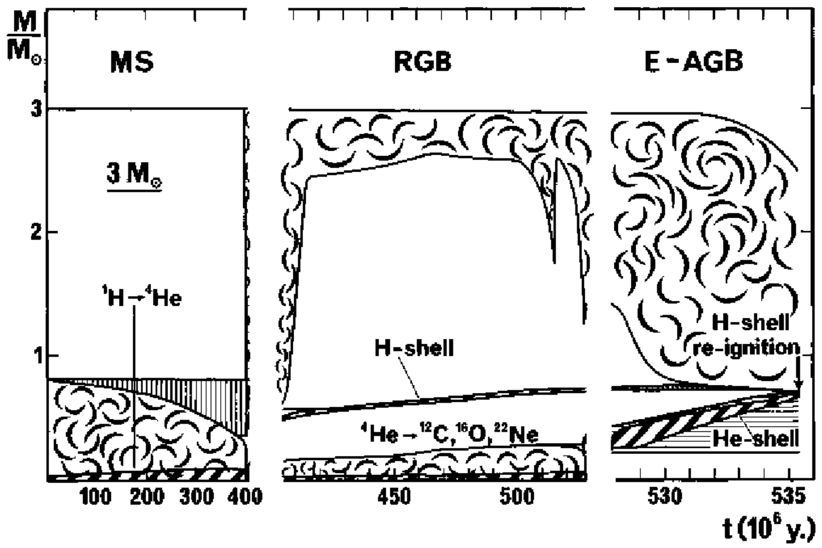

Abbildung 2.2 Modell des inneren Aufbaus eines 3 $M_\odot$ Sterns. Regionen mit Kernbrennen werden durch schräge Schraffur markiert. Die Zonen mit Wasserstoff und Helium sind vertikal schraffiert und die horizontal schraffierten Regionen zeigen ^{12}C, ^{16}O und ^{22}Ne. Die mit wirbelartigen Linien ausgefüllten Flächen kennzeichnen die konvektiven Bereiche. Abb. aus Maeder and Meynet [1989].

Diese Sterne verlieren durch einen Sternwind so viel Masse, dass sie die notwendige Temperatur zur Zündung des C-Brennens nicht erreichen.

2.2 Entwicklung auf dem AGB

Nachdem im Zentralgebiet das Helium zu Kohlenstoff und Sauerstoff verbrannt ist, haben diese Sterne einen C-O-Kern, dessen Elektronengas vollständig entartet ist, umgeben von einer He-brennenden Schale, einer nicht brennenden He-Schicht und darüber eine H-brennende Schale. Diese Phase wird als früher AGB oder E-AGB bezeichnet. Wenn die He-Schale fast aufgebraucht ist, wird die untere Kante der H-Schicht so heiß, dass das H-Brennen wieder zündet, worauf die He-Schalenquelle ausgeht. Für einige 1000 bis 10^4 Jahre brennt eine H-Schalenquelle, die eine neue He-Zone aufbaut. Mit Zunehmen der Masse der He-Schale wird die Temperatur an der Grenze zum C-O-Kern immer höher, bis schließlich das He-Brennen wieder zündet.

Die bei der Zündung freigesetze Energie wird hauptsächlich zur Expansion der inneren Bereiche verbraucht. Durch die Expansion erlischt die H-Schalenquelle und es brennt eine He-Schalenquelle, die die He-Schale teilweise aufbraucht und den C-O-Kern anwachsen läßt. Nach einigen hundert Jahren, wenn die He-Schale teilweise aufgebraucht ist, ist die Temperatur an der H-He-Grenze soweit angestiegen, dass die H-Schalenquelle wieder zündet. Diese Vorgänge wiederholen sich periodisch. Wasserstoff und Helium brennen abwechselnd in einer Schalenquelle.

Der Stern befindet sich in dem Zustand des *Thermischen Pulsens* auf den thermisch pulsenden Teil des AGB (TP-AGB). Auf den TP-AGB beträg die Leuchtkraft des Sterns ca. $10^4 L_\odot$. Eine Folge der Pulse ist das Mischen von nuklear prozessiertem Material, das tief im Inneren in der He-Schalenquelle erzeugt wird, an die Oberfläche, der *„third dredge up"*. Der eigentliche Mischungsprozess dauert nur ca. 10 Jahre nach Abschluß eines thermischen Pulses.

Die Prozesse der brennenden Schalen und die Effizienz des *„third dredge up"* bestimmen, ob sich der Stern zu einem Kohlenstoff-Stern entwickelt. Wenn beide Prozesse simultan aktiv sind, führen sie zu einer erheblichen Variation der Elementhäufigkeit an der Oberfläche.

Durch die eben erwähnten Prozesse entwickelt sich der M-Stern langsam (ca. 10^4 Jahre) zu einem C-Stern. Die Sterne, die im Übergangsbereich etwa die gleiche Kohlenstoff- und Sauerstoffhäufigkeit haben, bilden einen eigenen Spektraltyp, die S-Sterne.

Da die Dauer des Wasserstoffbrennens etwa zwei Größenordnungen länger als die des Heliumbrennens ist und die Mischung beim *„third dredge up"* schnell abläuft, erfolgt die zeitliche Veränderung des C/O- Verhältnisses in Stufen. Sterne mit 4 bis 5 $\mathrm{M}_\odot$ haben eine kürzere Periode zwischen zwei Pulsen, als solche mit geringerer Masse und durchlaufen damit eine größere Anzahl von Pulszyklen während ihrer AGB-Phase, sodass sie S-Sterne werden. Sterne mit $\mathrm{M}_* \leq 2M_\odot$ überspringen oft die S-Stern Phase.

In späten Entwicklungsphasen verlieren die Sterne genügend Masse durch Sternwinde, sodass die äußere, wasserstoffreiche Hülle vollständig verlorengeht. Bleibt der elektronenentartete Kern unterhalb einer Grenzmasse ($M_{\mathrm{WZ}} \approx 1.2 - 1.4M_\odot$), so endet der Stern seine Entwicklung als *Weißer Zwerg*.

2.3 Entwicklung massereicher Sterne

Sterne mit Anfangsmasse von $\geq 8M_\odot$ werden als *massereiche Sterne* bezeichnet. Diese Sterne haben eine kurze Lebensdauer ($\leq 10^7$ Jahre), besitzen eine hohe Leuchtkraft ($L_* \approx 10^6\mathrm{L}_\odot$) und zeigen einen merklichen Massenverlust durch einen Sternwind ($\dot{M} \approx 10^{-4} - 10^{-5}\mathrm{M}_\odot\mathrm{a}^{-1}$). Die Elementmischung entspricht der kosmischen Standardmischung zum Zeitpunkt und am Ort der Enstehung der Sterne. Der Stern erscheint spektroskopisch als O-Stern.

Bei solchen Sternen setzt sich der Wechsel von Brennphasen und Kontraktionsphasen fort, wobei der Kern und die angrenzenden Schalen schrittweise in immer höhere Elemente umgewandelt werden. Während der Hauptreihenphase brennt der Stern Wasserstoff nach dem CNO-Zyklus. Wenn der Kern ausgebrannt ist, zündet das Heliumbrennen. Dann brennt im Kern Wasserstoff in einer Schalenquelle und Helium im Kern. Die Sterne verlassen die Hauptreihe, sie entwickeln sich zum Überriesen. Sie zünden anschließend den Kohlenstoff im Kern. Dann brennt der Stern im Kern Kohlenstoff, in einer darüberliegenden Schale Helium und in einer nochmals darüberliegenden Schale Wasserstoff. Wenn der C-O-Kern aufgebraucht ist, kontrahiert der Kern, bis die nächste Kernsorte zu brennen anfängt.

Nach immer stärkeren Kontraktionen des Kerns zünden nacheinander Neon und Sauerstoff, bis sich im Kern die Elemente der Eisengruppe gebildet haben (Siliziumbrennen). Der Kern entartet schließlich beim Si-Brennen. Anschließend setzt der Kollaps des Eisenkerns zum Neutronenstern oder Schwarzen Loch ein. Am Ende der thermonuklearen Entwicklung haben wir einen Überriesen, dessen extrem dichter, entarteter Kern vor allem aus Eisen und Nickel besteht und von einer Folge von Schalen umgeben ist, in denen jeweils die nächst leichteren Element angereichert sind.

Die freigesetzte Gravitationsenergie beim Kollaps des zentralen Kerns führt zum Phänomen der Supernovaexplosion des Types II bzw. Types Ib oder Ic.

Je nach Anfangsmasse unterscheidet man drei verschiedene Wege:

- $M_* \leq 25 M_\odot$: O - RSG - SN
- $25 M_\odot \leq M_* \leq 60 M_\odot$: O - BSG - RSG - WN
- $M_* \geq 60 M_\odot$: O - BSG - RSG - LBV - WN - WC - SN

wobei

O	: O-Stern auf dem Hauptreihe
BSG	: Blauer Überriese
RSG	: Roter Überriese
LBV	: Leuchtkräftige Blaue Veränderliche
WN	: Stickstoffreicher Wolf-Rayet-Stern
WC	: Kohlenstoffreicher Wolf-Rayet-Stern
SN	: Supernova

Sterne mit Masse $M_* \leq 25 M_\odot$ erreichen kurz vor den Ende ihrer Lebensdauer noch den Roten-Riesen Ast. Sie sind kühle Riesensterne der Leuchtkraftklassen Ia,b. Ihre äußere Wasserstoffhülle ist vollständig konvektiv. Der Massenverlust dieser Sterne reicht nicht aus, um die äußere Wasserstoffhülle bis zum Zeitpunkt der Supernovaexplosion abzutragen.

Sehr massereiche Sterne ($M_* \geq 60 M_\odot$) erleiden starken Massenverlust, sodass sie immer im Bereich der Blauen Überriesen bleiben. Der Sternwind trägt nach einigen 10^6 Jahre die äußere Wasserstoffhülle ab. An der Oberfläche erscheint zunächst wasserstoffreiches Material, in der Wasserstoff nach dem CN-Zyklus gebrannt hat. Kohlenstoff ist fast vollständig in ^{14}N umgewandelt. Die Sauerstoffhäufigkeit ist etwas reduziert. Helium ist stark angereichert. Es herrscht kein vollständiges CNO-Gleichgewicht. Sterne in dieser Übergangphase werden als *Luminous Blue Variable* (LBV) bezeichnet.

Sterne mit $M_* \geq 25 M_\odot$ werden nach der RSG- oder LBV-Phase zu sogenannten *Wolf-Rayet-Sternen* (WR). Durch weiteren Massenverlust werden Schichten, in denen H-Brennen nach dem CNO-Zyklus stattgefunden hat, freigelegt. Sauerstoff und Kohlenstoff werden weitgehend in ^{14}N umgewandelt. Es herrscht vollständiges CNO-Gleichgewicht. Diese Elementmischung wird in den Wolf-Rayet-Sternen der Unterklasse WN beobachtet.

Nach einigen zehntausend Jahren werden Schichten freigelegt, in denen Heliumbrennen stattgefunden hat. Die Elementmischung enthält hauptsächlich ^{4}He, ^{12}C und ^{16}O. Neon ist stark angereichert. Spektroskopisch dominieren starke Linien des Kohlenstoffs, der Stern ist vom Spektraltyp WC.

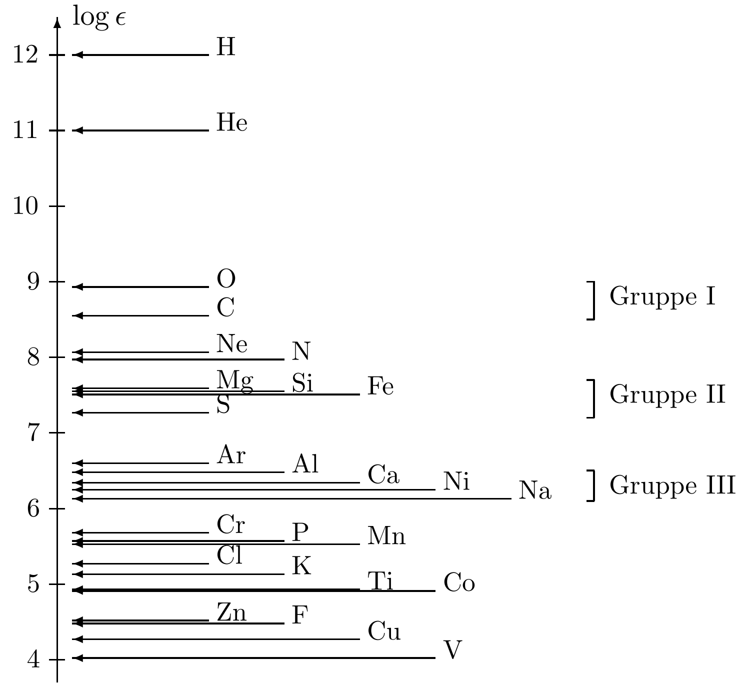

Abbildung 2.3 Kosmische Häufigkeit der 26 häufigsten Elemente. Daten nach Anders und Grevesse [1989] und Grevesse und Noels [1993].

2.4 Elementhäufigkeit

Die Häufigkeit der chemischen Elemente in den Sternen läßt sich aus der Auswertung ihrer Spektren herleiten. Hauptreihensterne der Scheibenpopulation zeigen alle eine ähnliche Zusammensetzung, daher spricht man häufig von einer *„kosmischen Häufigkeitsverteilung“* der Elemente.

Die kosmische Häufigkeitsverteilung ist das Resultat von Prozessen der Elementsynthese und des Materialkreislaufs im Kosmos.

Bei normaler chemischer Zusammensetzung (s.Abb. 2.3) sind die häufigsten Elemente Wasserstoff (H) und Helium (He), sie machen zusammen ca. 99% der Massendichte aus. Da He keine Verbindung eingeht, ist für die Chemie nur H von Bedeutung. Für alle schweren Elemente zusammengenommen bleibt nur ca. 1% der Masse.

Die Häufigkeiten dieser Elementen lassen sich in drei Gruppen einteilen:

1. Die Elemente O, C und N bilden eine Gruppe, deren Häufigkeit etwa 10^{-3} mal geringer ist als die von H.
2. Die Elemente Fe, Si, Mg und S bilden eine Gruppe, deren Häufigkeit ca. $3 \cdot 10^{-5}$ mal geringer ist als die von H.
3. Die Elemente Al, Ca, Ni und Na bilden eine Gruppe mit ca. $2 \cdot 10^{-6}$ mal kleinerer Häufigkeit als H.

Eine Eigenschaft dieser Standardmischung ist, dass die Häufigkeit von Sauerstoff (ϵ_O) größer als die von Kohlenstoff (ϵ_C) ist. Diese Elementmischung wird bei allen

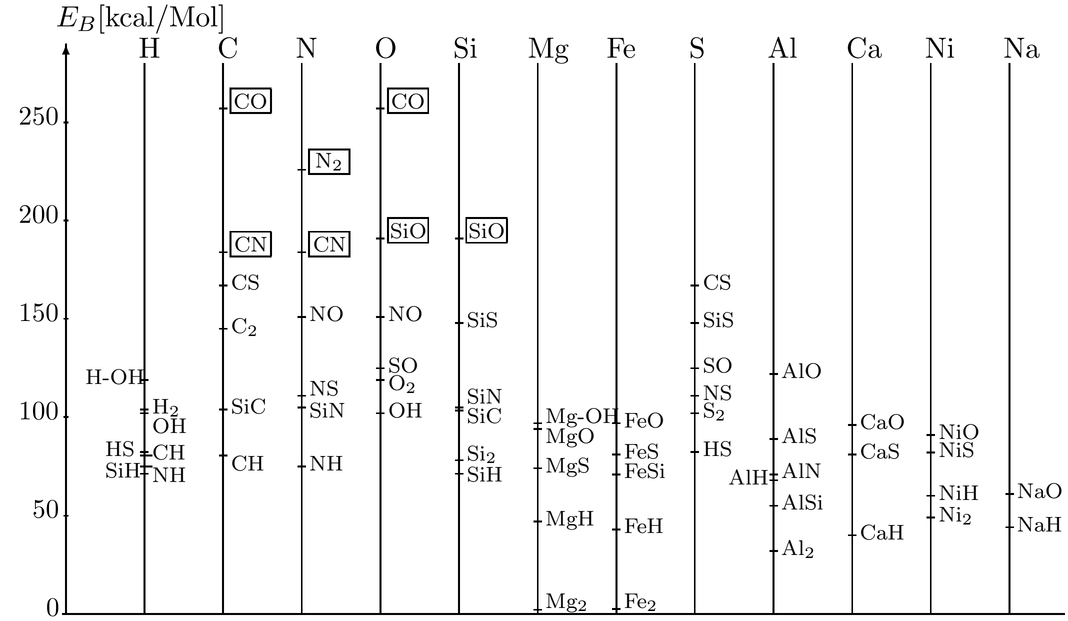

Abbildung 2.4 Bindungsenergien zweiatomiger Moleküle der häufigsten Elemente und einiger Radikal-Bindungsenergien. Besonders zu beachten sind die außergewöhnlich hohen Bindungsenergien von CO, N_2, SiO und CN. (Daten aus CRC-Handbuch, Lide [1995])

Hauptreihensternen und einem großen Teil aller weit entwickelten Riesensterne auf dem AGB angetroffen. Diese Sterne sind vom Spektraltyp M.

Beträchtliche Abweichungen werden bei weit entwickelten Sternen kurz vor dem Ende ihrer Lebensdauer beobachtet, wenn konvektive Durchmischungsvorgänge von den nuklearen Brennzonen im Inneren des Sterns bis in die Atmosphäre reichen und angebranntes Material den Atmosphärenschichten beimischen.

2.5 Molekülhäufigkeiten

Die molekulare Zusammensetzung der Gasphase legt fest, welche Substanzen als Staubteilchen auskondensieren können. Sie wird durch die Häufigkeit der chemischen Elemente und die Bindungsenergien der Moleküle bestimmt. In Abb. (2.4) und (2.5) sind die Bindungsenergien der wichtigsten zweiatomigen Moleküle dargestellt. Nur Moleküle mit den höchsten Bindungsenergie können in den kühlen Sternatmosphären existieren. Daher kommen nur wenige und einfach gebaute Moleküle in Sternatmosphären vor.

In der Standardmischung ($\epsilon_O > \epsilon_C$) ist das häufigste Molekül H_2, sofern die Temperatur niedrig genug für dessen Bildung ist. Von den Elementen O, C und N sind Verbindungen untereinander die häufigsten Moleküle. Aufgrund der hohen Bindungsenergie ist CO das stabilste zweiatomige Molekül. In M-Sternen ist der Kohlenstoff praktisch vollständig im CO gebunden. Der überschüssige Sauerstoff steht zur Bildung sauerstoffhaltiger Moleküle zur Verfügung.

Eine Bindungsmöglichkeit für O ist das Silizium, SiO bindet fast das gesamte Si. Dieses Molekül kann sich mit den Metallen bei hohen Temperaturen zu festen Sili-

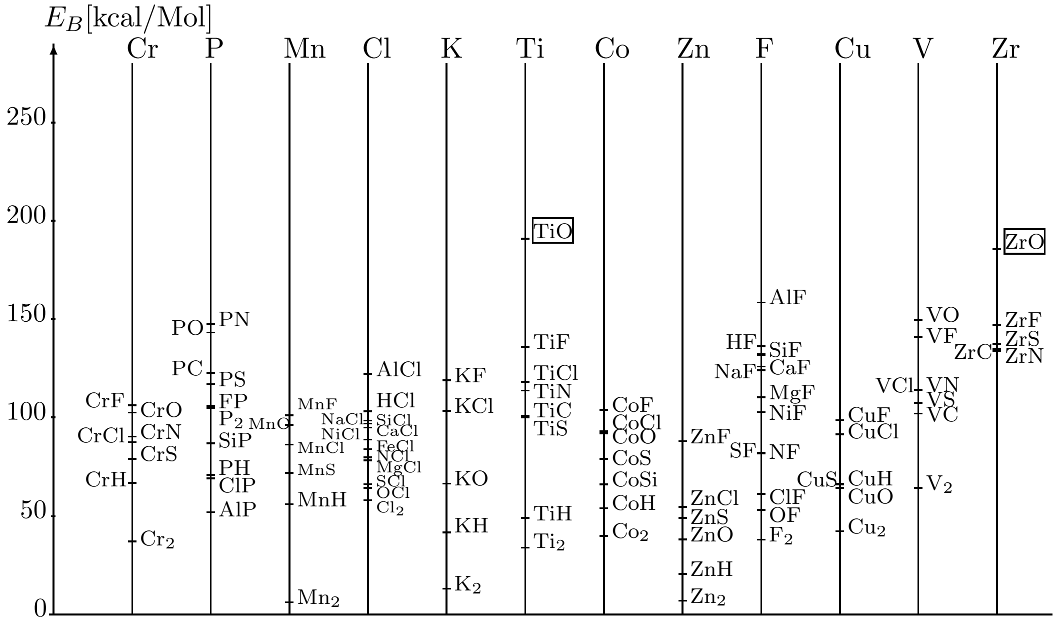

Abbildung 2.5 Bindungsenergien zweiatomiger Moleküle der etwas weniger häufigen Elemente. (Daten aus CRC-Handbuch, Lide [1995])

katmineralien verbinden, die in den zirkumstellaren Hüllen um M-Sterne als Staubteilchen beobachtet werden. Aufgrund der ebenfalls sehr starken Bindung des SiS ist ein kleiner Teil des Si in diesem Molekül gebunden. Derjenige Teil des Sauerstoffs, der nicht im CO und SiO gebunden ist, bildet mit Wasserstoff H_2O.

Beim Stickstoff hat das N_2-Molekül die zweitgrößte Bindungsenergie unter allen zweiatomigen Molekülen (nach CO). Auch CN ist aufgrund seiner starken Bindung in gewissen Mengen vorhanden.

Die Metalle Mg und Fe sind in der Gasphase hauptsächlich als freie Atome vorhanden da keine Moleküle mit hoher Bindungsenergie existieren.

Aluminium hat ebenfalls keine Moleküle mit besonders hoher Bindungsenergie. Ein wesentlicher Teil des Aluminiums ist bei niedrigen Temperaturen im AlO gebunden. Bei den Elementen Ni, Ca und Na liegen die Verhältnisse ähnlich wie bei Magnesium und Eisen. Sie kommen ebenfalls nur als freie Atome in der Gasphase vor.

Weitere Elemente haben viel zu geringe Häufigkeiten, als dass sie für das Problem der Staubbildung von Bedeutung wären. Nur die Moleküle TiO und ZrO haben eine sehr hohe Bindungsenergie. Das Titan ist daher bis zu sehr hohen Temperaturen praktisch vollständig im TiO gebunden. Deswegen könnten diese Moleküle Kondensationskeime für die Bildung von Staub aus den häufigeren Elementen sein.

In C-Sternen ($\epsilon_O < \epsilon_C$) ist der Sauerstoff vollständig im CO-Molekül blockiert, der überschüssige Kohlenstoff kann weitere Verbindungen eingehen. Der nicht im CO gebundene Kohlenstoff verbindet sich fast vollständig mit sich selbst (C_2), in geringer Menge mit N in CN und HCN und mit Wasserstoff zu C_2H_2.

Das Si bindet sich mit Schwefel in SiS. Aufgrund der geringen S-Häufigkeit wird jedoch nur ein Drittel des vorhandenen Si gebunden. Fe und Mg treten, wie bei der sauerstoffreichen Mischung, praktisch nur als freie Atome auf.

Die molekulare Zusammensetzung des Gases ist also bei M- und C-Sternen sehr unterschiedlich.

3. Opazität, Strahlungsdruck und Sternwind

3.1 Staubopazität

Der Massenextinktionskoeffizient κ spielt bei der Modellierung der Sternwinde eine wichtige Rolle.

Bei Temperaturen unterhalb von 1000 K kondensieren die Staubteilchen. Der Beitrag der Staubteilchen zum Massenabsorptionskoeffizienten (von der Größenordnung $1\mathrm{cm}^2/\ \mathrm{g}$) übersteigt den Beitrag der Atome und Moleküle aus der Gasphase (von der Gößenordnung $< 10^{-4}\mathrm{cm}^2/\mathrm{g}$) ganz erheblich. Existiert also Staub, so dominiert dieser die Opazität.

Zur Berechnung der Staubopazität wird angenommen, dass die Staubteilchen kleine Kugeln mit dem Radius a sind. Die Komponenten der komplexen Dielektrizitätskonstante ϵ können für die verschiedenen Staubmaterialien im Labor gemessen werden. Dann wird mittels der Mie-Theorie der Absorptions- und Streuquerschnitt z.B. sphärischer Teilchen, für alle Radien und Wellenlängen der Komponenten des Staubgemischs berechnet und das Ergebnis über die Häufigkeitsverteilung der Radien gemittelt. Für die Radienverteilung der Teilchen verwendet man üblicherweise das Modell nach Mathis et al. [1977], das zur Berechnung der Extinktion durch interstellare Staubteilchen entwickelt wurde. Auf diese Weise erhält man den wellenlängenabhängigen Massenextinktionskoeffizienten für das Gemisch und kann damit dessen Rosselandmittel berechnen.

Der Absorptionskoeffizient für die Mischung aus verschiedenen Staubteilchen und Gas wird in dieser Arbeit durch lineare Superposition der Beiträge der einzelnen Komponenten berechnet:

$$\kappa = \kappa_{\mathrm{gas}} + \sum_i f_i \kappa_{i,\mathrm{dust}} \ . \tag{3.1}$$

Dies würde exakt bei grauer Absorption gelten. Da die Extinktionskoeffizienten für Staub nur langsam mit λ variieren, gilt (3.1) zwar nicht exakt, aber wenigstens näherungsweise.

Für die numerische Berechnung werden die Rosselandmittel (in cgs-Einheiten) der Massenextinktionskoeffizienten der verschiedenen Staubmaterialien durch analytische Fitformeln genähert.

Kristallines Olivin ($\mathbf{MgFeSiO_4}$): (Gail & Sedlmayr [1999])

$$\kappa_{\mathrm{ol}}(T) = \Big[(6.147\cdot 10^{-7}T^{2.444})^{-2} + \Big((6.957\cdot 10^{4}T^{-2.329})^{2} + \sqrt{(3.505\cdot 10^{-4}T^{0.755})^{4} + (1.043\cdot 10^{-9}T^{2.523})^{4}}^{\,-1}\Big]^{-1/2} . \quad (3.2)$$

Pyroxen ($\mathbf{MgFeSiO_3}$): (Ferrarotti & Gail [2001])

$$\kappa_{\mathrm{py}}(T) = \left[\left(3.773\cdot 10^{-5}T^{2.017}\right)^{-2} + \left\{\left(1.5\cdot 10^{6}T^{-2.679}\right)^{-2} + \sqrt{(8.356\cdot 10^{-4}T^{0.7336})^{4} + (1.261\cdot 10^{-8}T^{2.272})^{4}}\right\}^{-1}\right]^{-\frac{1}{2}} . \quad (3.3)$$

Quarz ($\mathbf{SiO_2}$): (Gail & Sedlmayr [1999])

$$\kappa_{\mathrm{qu}}(T) = \Big[\Big((\frac{1}{3.898\cdot 10^{-6}T^{2.054})^{4}} + \frac{1}{(3.100\cdot 10^{5}T^{-2.622})^{4}}\Big)^{-1/2} + \big((2.023\cdot 10^{-5}T^{1.074})^{4} + (9.394\cdot 10^{-11}T^{2.701})^{4}\big)^{1/2}\Big]^{1/2} . \quad (3.4)$$

Eisen (Fe): (Gail & Sedlmayr [1999])

$$\kappa_{\mathrm{Fe}}(T) = \Big[\frac{1}{(3.341\cdot 10^{-5}T^{1.632})^{4}} + \frac{1}{(6.405\cdot 10^{-4}T^{.777})^{4} + (4.385^{-7}T^{1.981})^{4}}\Big]^{-1/4} . \quad (3.5)$$

FeSi: (Ferrarotti & Gail [2002])

$$\kappa_{\mathrm{FeSi}}(T) = \Big[\,\big(4.071\cdot 10^{-3}\,T^{.6981}\big)^{4} + \big(9.251\cdot 10^{-7}\,T^{1.849}\big)^{4}\,\Big]^{\frac{1}{4}} . \quad (3.6)$$

Siliziumkarbid (SiC): (Optische Konstanten aus Pegourie [1988])

$$\kappa_{\mathrm{SiC}}(T) = \Big[\frac{1}{(9.560\cdot 10^{-6}T^{1.710})^{4}} + \frac{1}{(7.791\cdot 10^{-4}T^{.8808})^{4} + (1.171\cdot 10^{-6}T^{1.879})^{4}}\Big]^{-1/4} . \quad (3.7)$$

Ruß (C): (Optische Konstanten aus Draine [1985])

$$\kappa_{\mathrm{C}}(T) = \Big[\frac{1}{(1.692\cdot 10^{-4}T^{1.813})^{4}} + \frac{1}{(3.167\cdot 10^{-2}T^{.612})^{4} + (2.938\cdot 10^{-5}T^{1.750})^{4}}\Big]^{-1/4} . \quad (3.8)$$

Gas: (Bell & Lin [1994])

$$\kappa_{\mathrm{Gas}} = 1\cdot 10^{-8}\cdot \rho^{2/3}\cdot T^{3} . \quad (3.9)$$

3.2 Strahlungsdruck

Der Strahlungsdruck setzt sich aus zwei Komponenten zusammen, nämlich Absorption und Streuung. Im Fall der Absorption von Photonen ist die Kraftdichte gegeben durch

$$\mathbf{F}_{ph} = \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{abs}\, \mathbf{H}_\nu \;, \tag{3.10}$$

wobei $\mathbf{H}_\nu = \frac{1}{4\pi}\oint d\Omega_{\hat{\mathrm{k}}} \hat{\mathbf{k}} I_\nu(\hat{\mathbf{k}})$ das erste Moment der Strahlungsintensität I_ν ist.

Im Fall der Streuung muß der Rückstoß des Staubteilchens berücksichtigt werden. Das führt zu einem zusätzlichen Term

$$\mathbf{F}_{ph} = \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{str}\, \mathbf{H}_\nu - \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{str} \frac{1}{4\pi}\oint d\Omega_{\hat{\mathrm{l}}} I_\nu(\hat{\mathbf{l}}) \oint d\Omega_{\hat{\mathrm{k}}} \hat{\mathbf{k}} \omega(\hat{\mathbf{l}} \to \hat{\mathbf{k}})\,, \tag{3.11}$$

wobei ω die Wahrscheinlichkeitsdichte einer Streuung aus der Richtung $\hat{\mathbf{l}}$ in die Richtung $\hat{\mathbf{k}}$ ist. Für den Fall isotroper Streuung ist ω konstant, und damit verschwindet die zweite Term in (3.11).

Man definiert einen flußgemittelten Absorptionskoeffizienten durch

$$\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}} = \frac{1}{H}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu\, H_\nu \tag{3.12}$$

mit

$$H = \int_0^\infty d\nu\, H_\nu \,. \tag{3.13}$$

Dann gilt für die radiale Kraftkomponente

$$\boxed{F_{ph} = \frac{4\pi}{c}\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}}\, H \;.} \tag{3.14}$$

3.3 Staubgetriebener Wind

Wir betrachten hier eine *stationäre, sphärisch symmetrische* Ausströmung aus einem isolierten Einzelstern mit gegebener Masse M_*, Radius R_*, Leuchtkraft L_* und Effektivtemperatur T_{eff}. Diese Größen hängen miteinander zusammen durch die Beziehung

$$L_* = 4\pi R_*^2\, \sigma\, T_{\mathrm{eff}}^4 \,. \tag{3.15}$$

T_{eff} ist etwa gleich der Oberflächentemperatur.

Die Dynamik der Strömung wird bestimmt durch die Erhaltungsgleichung der Masse

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho\, v\,, \tag{3.16}$$

wobei hier $\dot{M}$ die gesamte Massenverlustrate des Sterns (Gas und Staub) ist, und durch die Erhaltung des Impulses

$$\rho\, v\, \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{GM_r}{r^2\rho} + \frac{L_*}{4\pi c r^2}\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}} \,. \tag{3.17}$$

Der letzte Term beschreibt den Strahlungsdruck F_{ph}, unter der Annahme, dass *Strahlungsgleichgewicht* herrscht ($L = \mathrm{const}$), und unter Ausnutzung von

$$L_* = 4\pi R_*^2 \, 4\pi H. \tag{3.18}$$

Diese beiden Gleichungen bestimmen den Dichte- und Geschwindigkeitsverlauf in der Strömung.

Die Temperaturverteilung wird durch die Energiegleichung festgelegt. Für den Fall, dass in der Hülle Strahlungsgleichgewicht angenommen wird, ist der Temperaturverlauf durch das Gleichgewicht von Ein- und Abstrahlung bestimmt.

Man definiert die *Eddingtonsche Grenzleuchtkraft* über das Gleichgewicht zwischen Strahlungsdruck und der Gravitation

$$L_{\mathrm{Edd}} = \frac{4\pi \, c \, G M_*}{\langle \kappa' \rangle_{\mathrm{H}}} \, . \tag{3.19}$$

$\langle \kappa' \rangle_{\mathrm{H}}$ ist das Flußmittel des Massenabsorptionskoeffizienten des Staubs im Staub-Gas-Gemisch.

Die Impulsgleichung läßt sich wie folgt umformen:

$$v \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{G M_*}{r^2} (1 - \Gamma) \tag{3.20}$$

mit

$$\Gamma = \frac{L_*}{L_{\mathrm{Edd}}} \, . \tag{3.21}$$

Die Größe Γ ist das Verhältnis von auswärts gerichtetem Strahlungsdruck zu einwärts gerichteter Schwerebeschleunigung.

Der zweite Term auf der rechten Seite von (3.20) stellt die *effektive Schwerebeschleunigung* dar, die auf die Materie wirkt. Es sind zwei wesentlich verschiedene Fälle zu unterscheiden:

- $\Gamma < 1$. Für die Leuchtkraft bedeutet das

  $$L_* < L_{\mathrm{Edd}} \, . \tag{3.22}$$

  In diesem Fall ist die effektive Schwerebeschleunigung negativ, also einwärts gerichtet. In den äußeren Schichten des Sterns kann der nach außen abfallende Druck die effektive Schwerebeschleunigung kompensieren. Deswegen kann eine hydrostatische Konfiguration ($v = 0$) existieren.

- $\Gamma > 1$. Für die Leuchtkraft bedeutet das

  $$L_* > L_{\mathrm{Edd}} \, . \tag{3.23}$$

  Hier ist die effektive Schwerebeschleunigung positiv, also auswärts gerichtet. Die Schwerebeschleunigung kann in diesem Fall durch den Druckgradienten nicht kompensiert werden. Unter diesen Umständen wird die Materie nach außen strömen. Also:

$$\boxed{L_* > L_{\rm Edd} \implies \textit{Sternwind}\ .} \tag{3.24}$$

Die Eddingtonsche Grenzleuchtkraft hängt von der Größe des flußgemittelten Absorptionskoeffizienten $\langle\kappa'\rangle_{\rm H}$ ab und ist deswegen von der chemischen Zusammensetzung des Staubs und der Effektivtemperatur des Sterns abhängig.

Sterne auf dem oberen AGB, bei denen massive zirkumstellare Staubhüllen beobachtet werden, haben Leuchtkräfte von $L_* \geq 10^4 L_\odot$ (Habing [1996]). Bei diesen Sternen ist die Existenz eines Sternwindes zu erwarten, der durch den Strahlungsdruck auf die Staubteilchen angetrieben wird.

Man kann die Gleichung der Impulserhaltung (3.20) wie folgt umformen:

- Zunächst wird der Druck eliminiert mit Hilfe der Zustandsgleichung für ideale Gase
$$p = \rho c_T^2\,. \tag{3.25}$$
Hier ist
$$c_T = \sqrt{\frac{kT}{\mu m_{\rm H}}} \tag{3.26}$$
die *isotherme Schallgeschwindigkeit* und μ das mittlere Molekulargewicht. Es gilt somit
$$v\,\frac{\partial v}{\partial r} = \underbrace{-\frac{c_T^2}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r}}_{-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ . \tag{3.27}$$

- Dann wird, mit Hilfe der Gleichung (3.16) der Massenerhaltung, die Dichte ρ eliminiert
$$v\,\frac{\partial v}{\partial r} = -c_T^2\underbrace{(-\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{r})}_{\frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial r}} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ . \tag{3.28}$$

Schließlich ergibt sich ein Ausdruck für die Geschwindigkeit

$$\boxed{(v^2 - c_T^2)\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial r} = 2\frac{c_T^2}{r} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ .} \tag{3.29}$$

Dies ist eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für die Geschwindigkeit. Sie bestimmt zusammen mit einer Anfangsbedingung vollständig die Ausströmgeschwindigkeit des Gases in einem Sternwind, falls der radiale Verlauf von c_T^2 und Γ bekannt sind.

Die Differentialgleichung (3.29) hat bei $r = r_c$ einen singulären Punkt, für den

$$v(r_c) = c_T(r_c) \tag{3.30}$$

gilt.

Falls $v(r)$ bei $r = r_c$ stetig sein soll, muß die rechte Seite von Gleichung (3.29) an dieser Stelle ebenfalls verschwinden

$$2 - \frac{\partial \ln c_T^2}{\partial \ln x} - \frac{GM_*}{R_* c_T^2(x)} \frac{1 - \Gamma(x)}{x} = 0 \text{ , bei } \quad r = r_c \tag{3.31}$$

wobei

$$x = \frac{r}{R_*} \tag{3.32}$$

eine dimensionslose Variable ist. R_* ist der Sternradius.

Mit der Bedingung (3.30) erhält man die Windlösungen für Sternwinde, die in der Photosphäre mit Unterschallgeschwindigkeit starten und in großer Entfernung vom Stern Überschallgeschwindigkeit erreichen. Der Punkt r_c wird wegen dieser Eigenschaft als *Schallpunkt* bezeichnet.

Sofern man sich für das Staubwachstum interessiert, kommt es auf den Teil der Lösung an, in dem $v(r_c) > c_T(r_c)$ ist. Deswegen wird folgende Vereinfachung verwendet. Die Geschwindigkeit wird auf einen konstanten Wert gesetzt, bis die Kondensation anfängt. Ab diesem Punkt wird die Gleichung (3.29) integriert, wobei der Druckgradient vernachlässigt wird, da die Strömung bei diesen Radien eine hohe Machzahl erreicht.

3.4 Temperaturschichtung

Den Temperaturverlauf bestimmt man – für den Fall, dass im Sternwind Strahlungsgleichgewicht vorliegt – aus der Erhaltung der Strahlungsenergie. Man muß dazu das sphärisch symmetrische Strahlungstransportproblem in den äußeren Schichten des Sterns und in der zirkumstellaren Staubhülle lösen.

Aus den Momentengleichungen für die Strahlungsintensität kann man zu einer Näherung für den Temperaturverlauf gelangen (Lucy [1971], [1976]).

Das Momentengleichungssystem ist

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 H_\nu = -\kappa_\nu^{abs} J_\nu - \sum_i \kappa_{i\nu}^{abs} B_\nu(T_i) \; . \tag{3.33}$$

und

$$\frac{\partial K_\nu}{\partial r} + \frac{3K_\nu - J_\nu}{r} = -\kappa_\nu^{ext} H_\nu \; . \tag{3.34}$$

J_ν, H_ν und K_ν sind das 0., 1. und 2. Moment der Strahlungsintensität. κ_i sind die Absorptionskoeffizienten der einzelnen Teilchensorten und T_i die Temperatur der Staubsorten.

Mit dem folgenden Ansatz für die Winkelverteilung

$$I_\nu(r,\mu) = \begin{cases} I_\nu^+(r) & \text{für } \mu \geq \mu_* \\ I_\nu^-(r) & \text{für } \mu < \mu_* \end{cases} \quad , \tag{3.35}$$

wobei

$$\mu_* = \cos\Theta_* = \sqrt{1 - \left(\frac{R_*}{r}\right)^2} \tag{3.36}$$

ist, lassen sich die Momente berechnen. Es gilt

$$J_\nu = \frac{1}{2}[I_\nu^+ + I_\nu^-] - \frac{\mu_*}{2}[I_\nu^+ + I_\nu^-] \tag{3.37}$$

und

$$H_\nu = \frac{1}{4}[I_\nu^+ - I_\nu^-](1-\mu_*^2) \ . \tag{3.38}$$

Man kann diese Gleichungen nach I_ν^+ und I_ν^- auflösen.

Für K_ν gilt

$$K_\nu = \frac{\mu_*^3 + 1}{6} I_\nu^- + \frac{1-\mu_*^3}{6} I_\nu^+ \ . \tag{3.39}$$

Nach Einsetzen von I_ν^+ und I_ν^- ergibt sich

$$\boxed{K_\nu = \frac{1}{3}J_\nu + \frac{2}{3}\mu_* H_\nu \ .} \tag{3.40}$$

Diese Beziehung kann als Abschlußbedingung zur Lösung der Momentengleichung verwendet werden.

Mit (3.40) lassen sich die Momentengleichungen wie folgt umformen

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2 H_\nu = -\kappa_\nu^{abs} J_\nu - \sum_i \kappa_{i\nu}^{abs} B_\nu(T_i) \tag{3.41}$$

und

$$\frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial r}J_\nu + \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\mu_* H_\nu + \frac{2}{r}\mu_* H_\nu = -\kappa_\nu^{ext} H_\nu \ . \tag{3.42}$$

Man definiert eine neue Tiefenvariable τ_L

$$\frac{\mathrm{d}\tau_L}{\mathrm{d}x} = -\frac{R_* \langle\kappa\rangle_H}{x^2} \tag{3.43}$$

mit folgender Randbedingung

$$\lim_{r\to\infty} \tau_L(r) = 0 \ . \tag{3.44}$$

Diese beschreibt den simultanen Einfluß von Extinktion und geometrischer Verdünnung auf das Strahlungsfeld.

Die frequenzintegrierten Gleichungen (3.41) und (3.42) können unter der Annahme von Strahlungsgleichgewicht und Verwendung der Größe τ_L integriert werden. Für die mittlere Strahlungsintensität ergibt sich schließlich

$$J(r) = 2H_0 \left[1 - \mu_* + \frac{3}{2}\tau_L(r) \right] \tag{3.45}$$

wobei

$$H_0 = \frac{\sigma T_*^4}{4\pi} \tag{3.46}$$

ist, unter Berücksichtigung der Randbedingung

$$\lim_{r\to\infty} J(r) = 0 \; . \tag{3.47}$$

Nach Definition gilt im Strahlungsgleichgewicht

$$\kappa_B^{abs} \frac{\sigma T^4}{\pi} = \kappa_J^{abs} J \; . \tag{3.48}$$

Aus (3.45) kann man jetzt die Temperaturverteilung im Strahlungsgleichgewicht bestimmen

$$\boxed{T^4(r) = \frac{1}{2} T_*^4 \left[1 - \mu_*(r) + \frac{3}{2}\tau_L(r) \right] \frac{\kappa_J^{abs}}{\kappa_B^{abs}} \; .} \tag{3.49}$$

Diese Gleichung legt die Temperaturschichtung fest.

4. Staubkondensation in S-Sternen

Staubbildung in M- und C-Sternen ist schon früher ausführlich untersucht worden (siehe z.B. die review-Artikel von Gail & Sedlmayr [1998a] für M-Sterne und Cherchneff [1998] für C-Sterne). Das Problem der Staubbildung in S-Sternen wird in diese Arbeit erstmals untersucht.

4.1 Sterneigenschaften auf dem AGB

4.1.1 Einführung

In der Endphase ihrer Entwicklung werden die meisten Sterne zu effizienten Staubfabriken. Sterne mit kleiner oder mittlerer Masse (Anfangsmasse $M_* \leq 8M_\odot$) verlieren, als Riesensterne auf dem AGB den Großteil ihrer Masse in einem massereichen Sternwind und bilden optisch sehr dicke Staubhüllen. Massereiche Sterne mit einer Anfangsmasse von $M \leq 25M_\odot$ erreichen den RGB, bevor sie als Supernova explodieren. Sie verlieren in ihrer Entwicklung als Superriesen auf dem RGB einen wesentlichen Teil ihrer Masse durch einen massereichen, kühlen Sternwind und bilden optisch sehr dicke Staubhüllen, nachdem sie bereits in ihrer vorherigen Entwicklung als O- oder B-Sterne ohne Bildung von Staub einen wesentlichen Massenverlust durch einen heißen Sternwind erlitten haben.

Die Elementmischung in den Sternwinden von AGB-Sternen ist entweder reich an Sauerstoff (M-Sterne) oder Kohlenstoff (C-Sterne) und hat in einigen wenigen Fällen beinahe gleiche Häufigkeiten von O und C (S-Sterne). Bei RGB-Sternen ist die Elementmischung immer sauerstoffreich. Abhängig von dem Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnis sind die Staubmischungen, die sich im Sternwind kühler Riesensterne bilden, ganz unterschiedlich.

Der Staub ist eine Mischung aus verschieden Mineralpartikeln, die im ausströmenden Gas kondensieren. Die Zusammensetzung der Kondensate hängt von der Elementzusammensetzung der Sternoberfläche ab.

Entsprechend der Zugehörigkeit zu den drei völlig verschiedenen spektralen Erscheinungen von kühlen Sternen, auf welchen die Klassiffkation als Spektraltyp M, S oder C basiert, werden drei völlig verschiedene chemische Zusammensetzungen der

Sternoberflächen beobachtet. Die wesentliche, für die verschiedenen Spektren in M-, S oder C-Sternen verantwortliche Eigenschaft ist das Verhältnis der Sauerstoff- und Kohlenstoffshäufigkeiten (Fujita, Warner [1968]). M-Sterne haben ein C/O-Verhältnis < 1. In diesen Sternen kondensieren sauerstoffhaltige Staubpartikel wie Mg-Fe-Silikate, Ca-Al-Verbindungen, metallisches Eisen, und andere Minerale (Grossman [1972]). In C-Sternen ist das C/O-Verhältnis > 1, dies erlaubt die Kondensation von Kohlenstoffruß , SiC, Sulfiden, und Nitriden (Lattimer et al. [1978]). S-Sterne haben etwa gleiche Sauerstoff-Kohlenstoff-Häufigkeiten und unterscheiden sich in den chemischen Eigenschaften von M- und C-Sternen. Es gibt zwei Klassen von S-Sternen. *Intrinsische* S-Sterne sind thermisch pulsende Sterne auf dem AGB. *Extrinsische* S-Sterne sind die Sekundärkomponente in einem Doppelsternsystem, in dem sich die Primärkomponente bereits in einen Weißen Zwerg entwickelt und dabei das Stadium einer C-Sterns durchlaufen hat. Durch Massentransfer hat die Sekundärkomponente S-Stern Häufigkeiten angenommen.

4.1.2 Der M-S-C-Übergang

Sterne mit Anfangsmassen zwischen $2 \leq M_* \leq 8M_\odot$ auf der Hauptreihe erreichen am Ende ihrer Lebensdauer schließlich den AGB, wo sie zu regelrechten „Staubfabriken“ werden. Anfangs haben diese Sterne die Standard-Elementzusammensetzung. Durch den ersten und zweiten *„dredge up“* auf dem RGB und frühen AGB nimmt die He- nur etwas und die H-Häufigkeit wesentlich zu, während die C-Häufigkeit abnimmt. Die Änderung dieser Häufigkeiten beeinflußt nicht die Häufigkeiten der für die Kondensation von Staub wichtigen Elemente. Die Sterne beginnen am oberen Ende des AGB das thermische Pulsen, nach einigen Pulsen beginnt die Änderung der Häufigkeiten auf der Oberfläche aufgrund des *„ third dredge up*, wodurch Produkte der H- und He-Brennzone in die Konvektionszone hochgemischt werden.

Am wichtigsten ist der schrittweise Anstieg der Kohlenstoffhäufigkeit nach jedem thermischen Puls in der Zentralzone, von C/O≈ 0.4 bis auf C/O> 1, wodurch der Stern zum Kohlenstoffsstern wird. Wenn C/O $\approx$1 ist, erscheint der Stern als S-Stern. Sterne mit höherer Masse erfahren eine größere Anzahl von Pulsen mit einer kleineren Erhöhung des C/O-Verhältnisses nach jedem Puls als Sterne mit kleinerer Masse. Diese Sterne werden für eine gewiesse Zeit S-Sterne, bis sie sich zu C-Sternen entwickeln.

Das *„third dredge up“* ändert auch die Häufigkeiten einiger anderer Elemente, die He- und Ne-Häufigkeit und die Häufigkeiten der *s*-Prozess Elemente nehmen z.B. zu. Dies hat aber keine Konsequenz für die Staubproduktion.

Sterne mit Massen zwischen $4...5M_\odot$ und $8M_\odot$ erfahren das *„hot bottom“* brennen, bei dem der im *„third dredge up“* hochgemischte Kohlenstoff an der Untergrenze der Konvektionszone im CN-Zuklus in ^{14}N umgewandelt wird. Diese Sterne werden deswegen keine C-Sterne (Lattanzio & Forestini [1999]) und wahrscheinlich auch nicht S-Sterne.

Wenn das *„hot bottom“* brennen möglich ist, dann hat das in Verbindung mit dem *„third dredge up“* erhebliche Konzequenzen auf die Entwiclung der chemischen Zusammensetzung der Hülle und des Materials, das bei den Massenverlustprozessen

Tabelle 4.1: Elementhäufigkeiten für das Sonnensystem (Anders & Grevesse [1989] and Grevesse & Noels [1993]) und Häufigkeiten für Sterne auf dem asymptotischen Riesenast.

El.	$\epsilon_\odot$	ϵ_{AGB}		
	M	M	S	C
He	$9.75\,10^{-2}$	$1.04\,10^{-1}$	$1.04\,10^{-1}$	$1.04\,10^{-1}$
C	$3.55\,10^{-4}$	$2.33\,10^{-4}$	$6.87\,10^{-4}$	$8.24\,10^{-4}$
N	$9.33\,10^{-5}$	$2.52\,10^{-4}$	$2.52\,10^{-4}$	$2.52\,10^{-4}$
O	$7.41\,10^{-4}$	$6.87\,10^{-4}$	$6.87\,10^{-4}$	$6.87\,10^{-4}$
Mg	$3.85\,10^{-5}$	$3.85\,10^{-5}$	$3.85\,10^{-5}$	$3.85\,10^{-5}$
Si	$3.58\,10^{-5}$	$3.58\,10^{-5}$	$3.58\,10^{-5}$	$3.58\,10^{-5}$
S	$1.85\,10^{-5}$	$1.85\,10^{-5}$	$1.85\,10^{-5}$	$1.85\,10^{-5}$
Ti	$8.60\,10^{-8}$	$8.60\,10^{-8}$	$8.60\,10^{-8}$	$8.60\,10^{-8}$
Fe	$3.24\,10^{-5}$	$3.24\,10^{-5}$	$3.24\,10^{-5}$	$3.24\,10^{-5}$
Zr	$4.09\,10^{-10}$	$4.09\,10^{-10}$	$4.09\,10^{-9}$	$8.00\,10^{-9}$

abgeworfen wird. Bei massereichen Sternen auf dem AGB hängt die C-Häufigkeit von der Konkurrenz zwischen *„third dredge up“* und *„hot bottom“* brennen ab.

Sterne mit $M_* < 2M_\odot$ auf der Hauptreihe erreichen ebenfalls am Ende ihrer Lebensdauer den AGB und bilden dort Staub, doch sie verlieren ihre äußere Hülle ehe sie zu C-oder S-Sternen.

4.1.3 Häufigkeit der Elemente

Die für S-Sterne charakteristischen Elementhäufigkeiten entstehen während der Entwicklung von Sternen mit Anfangsmassen zwischen ca. 2 $M_\odot$ und 4 $M_\odot$.

Die Tabelle 4.1 zeigt die im Modell verwendeten Elementhäufigkeiten. Die erste Spalte zeigt die Standardhäufigkeiten. Die zweite Spalte zeigt die geschätzte durchnittliche Häufigkeit einiger wichtiger Elemente für Sterne mit PopI Metallizität im Zeitpunkt des Beginns Staubproduktion.

Die Spalten 3 und 4 zeigen die geschätzten Häufigkeiten für S- und C-Sterne. Für die Elemente He, C, O und H sind die normalen Häufigkeiten (Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993]) entsprechend den Verhältnissen, die sich für die Änderungen der Häufigkeiten in der Atmosphäre des Sterns bei der Entwicklung von der Hauptreihe bis zum frühen AGB ergeben, skaliert. Die Änderungen sind aus Modellrechnungen von Schaller et al. [1992] für die Entwicklung von Sternen kleiner und mittlerer Masse entnommen. Die Ergebnisse stimmen mit den beobachteten durchnittlichen Häufigkeiten in AGB Sternen überein (Smith & Lambert [1990]).

Die Mg- und Si-Häufigkeiten für M-, S-, und C-Sterne in Tabelle 4.1 stammen aus Anders & Grevesse [1989]. Diese sind nicht wirklich representativ für die durchnittliche kosmische Häufigkeit, bei der das für die Staubbildung wichtige Mg/Si-Verhältniss etwas höher liegt (Edwardsson et al.[1993], Snow & Witt [1996], Ferrarotti

& Gail [2002]). Die Abhängigkeit der Staubbildung in Mg-armen Sternen wird in Kapitel 5 behandelt. Für die schweren Elemente, von Na bis Fe, werden die Standardhäufigkeiten verwendet.

4.1.4 Beobachtete Staubeigenschaften

Intrinsische S-Sterne haben eine zirkumstellare Staubhülle. Nur sie befinden sich auf dem AGB. Extrinsische S-Sterne zeigen keine zirkumstellare Hülle (Jorissen et al.[1993]) und sind hier ohne interesse.

S-Sterne zeigen im Infrarotbereich auf dem Untergrund einer kontinuierlichen Emission auch breite Emissionsbanden von Silikatstaub und in einigen Fällen von SiC-Staub.

4.1.5 Massenverlust und Windgeschwindigkeit auf dem AGB

Praktisch alle Sterne verlieren Masse durch einen Sternwind. Die Rate dieses Massenverlustes hängt stark von der Leuchtkraft und von der Temperatur der Sternoberfläche ab. Die Massenverluste von S-Sternen sind aus Beobachtung der CO Mikrowellenlinien abgeleitet z.B. von Jorissen & Knapp [1998] und Groenewegen & de Jong [1998]. Die beobachteten Massenverlustraten in intrinsischen S-Sternen liegen zwischen 10^{-7} und 10^{-5} $M_\odot a^{-1}$. Die Windgeschwindigkeiten sind ebenfalls aus Beobachtungen von CO-Linien bestimmt, sie liegen in dem Bereich von v=5 bis 20 km s^{-1} (Jorissen & Knapp [1998] und Groenewegen & de Jong [1998]).

4.1.6 Stellare Parameter

Kerschbaum [1999] und Kerschbaum & Hron [1996] modellierten mit einigem Erfolg die globale Struktur der spektralen Energieverteilung von Sternen auf dem AGB mit einer Staubhülle durch zwei Schwarzkörper-Energieverteilungen, eine für den Zentralstern und eine zweite für die Hülle. Die ermittelte Schwarzkörpertemperatur dieser Sterne beträgt für S-Sterne um die 2500 K. Dies ist konsistent mit den Ergebnissen von van Belle et al. [1997]. In den hier gemachten Modellrechnungen wird das stellare Strahlungsfeld durch das eines Schwarzkörpers der Temperatur von 2500 K genähert. Basierend auf Hipparchos Parallaxen wurden die stellaren Leuchtkräfte für eine ganze Reihe galaktischer S-Sterne von Van Eck et al. [1998] bestimmt. Sie fanden heraus, dass für die meisten Sterne $5\times10^3 L_\odot < L_* < 10^4 L_\odot$ gilt. Dies stimmt mit den Erkenntnissen von van Belle et al. [1997] und der Position von S-Sternen aus der Magellanschen Wolke im HR-Diagramm (Lloyd Evans [1984]) überein. In den Modellrechnungen wird der in theoretischen Modellrechnungen für zirkumstellare Staubhüllen kanonische Wert von $L_* = 10^4 L_\odot$ verwendet. Das liegt an der oberen Grenze des beobachteten Bereichs für reale Sterne. Geringere Leuchtkräfte würden auf geringere Grade von Kondensation und kleinere Expansionsgeschwindigkeiten führen.

4.2 Zusammensetzung der Gasphase in chemischen Gleichgewicht

Aus den Atomen und Molekülen der Gasphase kondensiert Staub. Die chemische Zusammensetzung der Gasphase bestimmt die Art von Teilchen, welche für die Prozesse der Staubkondensation und die chemischen Reaktionen zur Verfügung stehen. Die Chemie der Gasphase ist daher der Ausgangspunkt der Betrachtungen zur Kondensation von Staubteilchen.

Die Struktur der äußeren Schichten bei spätem Riesen ist ziemlich komplex da diese Sterne sich in einer Region des HRD befinden, in der der AGB durch ein Instabilitätsgebiet verläuft (z.B. Wood [1990a, 1990b], Gautschy & Saio [1995], Xiong et al. [1998]). Die Sterne pulsieren und durch ihre äußere Hülle laufen Stoßwellen. Im Folgenden werden alle Probleme, die aus einer möglichen Nicht-Gleichgewichtschemie der Gasphase in den Stoßwellen stammen, vernachlässigt.

Die Zusammensetzung einer Festkörper-Gas-Mischung im chemischen Gleichgewicht bei dem M-S-C- Übergang wird berechnet. Das Ziel ist, die häufigsten Moleküle in der Gasphase zu bestimmen, die für die Kondensationsprozesse zur Verfügung stehen, und die stabilsten Festkörper, welche mögliche Kandidaten für die Kondensation in Sternwind sind. Die Ergebnisse werden in das Nicht-Gleichgewichtsmodell der Staubkondensation in kühler Gasausströmung eingehen.

4.2.1 Chemisches Gleichgewicht

Ein thermodynamisches System besitze die Temperatur T, die innere Energie U, nehme das Volumen V ein und stehe unter dem Druck p. Befindet sich das System im Gleichgewicht, so genügen seine stoffliche Zusammensetzung und zwei Zustandsgrößen, um den Zustand völlig zu bestimmen.

Ein System ist bei vorgegebenem Druck und festgehaltener Temperatur im Gleichgewicht, wenn die freie Enthalpie den kleinsten Wert hat. Die Gleichgewichtsbedingung bei fester Temperatur und festem Druck lautet

$$dG = -S\,dT + V dp + \mu_i\,dN_i = 0\ . \tag{4.1}$$

Nach Definition gilt für die freie Enthalpie

$$G = U - TS + pV = H - ST\ . \tag{4.2}$$

S ist die Entropie des Systems und $H = U + pV$ ist die Enthalpie. Die freie Enthalpie wird auch *Gibbs-Potential* genannt. Nach (4.1) gilt

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial N_i}\right)_{T,p}\ . \tag{4.3}$$

μ_i ist das entsprechende chemische Potential und entspricht der Energie, die nötig ist, um dem System ein Teilchen der Sorte i hinzuzufügen. N_i ist die Teilchenzahl einer Teilchensorte mit dem Index i. Die Beziehung

$$G(T,p,N_i) = \sum_i N_i\ \mu_i(T,p) \tag{4.4}$$

wird als *verallgemeinerte Gibbs-Duhem-Relation* bezeichnet.

Das Gleichgewicht einer chemischen Reaktion in Gasen wird durch das Massenwirkungsgesetz bestimmt. Zwischen den Bestandteilen eines Gasgemisches sei eine chemische Reaktion

$$\sum_i \nu_i A_i = 0 \tag{4.5}$$

möglich. A_i steht für die Teilchensorten und ν_i ist der stöchiometrische Koeffizient der Teilchensorte i. Die ν_i geben an, wie viele Mole der Substanz A_i an der Reaktion beteiligt sind.

Läuft die Reaktion nach dem Schema (4.5) ab, d.h. erzeugt sie ν_i Mole der Stoffart A_i, so entstehen

$$dN_i = \nu_i \; dk \tag{4.6}$$

Mole der Stoffart A_i, wenn die Reaktion um dk fortschreitet. Der Parameter k beschreibt die Freiheit des Systems zu Reaktionen in der einen oder anderen Richtung. An dk knüpft sich also der Zuwachs der freien Enthalpie. Bei gegebenem T und p ist das Gleichgewicht durch das Minimum von G bestimmt. Daher muß

$$\frac{dG}{dk} = \sum_i \frac{\partial G(T,p,N_i)}{\partial N_i} \nu_i = 0 \tag{4.7}$$

gelten. Aus den Gleichungen (4.4) und (4.7) folgt

$$\sum_i \mu_i \; \nu_i = 0 \; . \tag{4.8}$$

4.2.2 Berechnung der chemischen Gleichgewicht

Die chemische Zusammensetzung einer Mischung, in der außer der Gasphase auch Kondensate auftreten, berechnet man aus zwei Gleichungssätzen:

- Das Massenwirkungsgesetz für jede einzelne Substanz, und
- die Nebenbedingungen für die Häufigkeit der Elemente.

Für jede gasförmige oder feste chemische Verbindung der Form $\mathrm{A_iB_jC_k},...$ ist die Gleichung für die Bildung der Substanz aus den freien Atomen A, B, C, ... gegeben durch

$$i\mathrm{A} + \mathrm{jB} + \mathrm{kC}... \longrightarrow \mathrm{A_iB_jC_k}.... \tag{4.9}$$

Im chemischen Gleichgewicht gilt

$$\frac{a_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...}}{p_\mathrm{A}^i p_\mathrm{B}^j p_\mathrm{C}^k ...} = e^{-\sum_i \Delta G_i/RT} = K_p(T) \quad , \tag{4.10}$$

wobei $a_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...}$ die Aktivität des Stoffs $\mathrm{A_iB_jC_k}$... ist. ΔG ist die Änderung der freien Enthalpie bei der Reaktion (4.9). $p_\mathrm{A}, p_\mathrm{B}, p_\mathrm{C}, ...$ sind die Partialdrucke der freien Atome der Elemente A, B, C... in der Gasphase.

Für ideale Gase sind die Aktivitäten $a_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...}$ gleich den Partialdrucken $p_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...}$ im chemischen Gleichgewicht (Atkins [1994]) und wir haben

$$p_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...} = p_{\mathrm{A}}^i p_{\mathrm{B}}^j p_{\mathrm{C}}^k ... e^{-\Delta G/RT} \quad \text{(Moleküle)}\,. \tag{4.11}$$

Wenn man jeweils den Partialdruck $p_{\mathrm{A}}, p_{\mathrm{B}}, p_{\mathrm{C}}, ...$ der freien Atome bestimmt hat, ist der Partialdruck aller Moleküle in der Mischung durch die Gleichung (4.11) bestimmt.

In dem Fall, dass Kondensate auftreten, ist die Aktivität gleich eins (Atkins [1994]). Dann gilt:

$$1 = p_{\mathrm{A}}^i p_{\mathrm{B}}^j p_{\mathrm{C}}^k ... e^{-\Delta G/RT} \quad \text{(Festkörper)}\,. \tag{4.12}$$

Die Gleichung (4.12) definiert in einem Zustand chemischen Gleichgewichts eine Relation zwischen den Partialdrucken der freien Atome, welche bei der Bildung jeder der existierenden Kondensate involviert sind.

Für die Festkörper, die für die gegebene Elementmischung, Druck und Temperatur nicht stabil sind, ist die Aktivität

$$a_{\mathrm{A}_i\mathrm{B}_j\mathrm{C}_k...} < 1\,. \tag{4.13}$$

Im Gleichgewichtszustand ist die Aktivität der möglichen Kondensate gleich eins; ist sie kleiner als eins, dann kondensiert die Substanz nicht.

Für jeden Festkörper, der in einer gegebenen Elementmischung kondensiert, wird ein Kondensationsgrad f definiert. f wird definiert als der Bruchteils der Kerne eines Elements, das für die Kondensation eines Festkörpers notwendig ist, z.B. Si bei den Silikaten.

Die Nebenbedingungen für die Erhaltung der Häufigkeiten der Elemente lauten:

$$P_{\mathrm{H}}\Bigg(\epsilon_k - \sum_{\substack{\text{alle Festkörper } l \\ \text{mit Element k}}} \nu_{k,l} f_l \epsilon_l\Bigg) = \sum_{\substack{\text{alle Moleküle } j \\ \text{mit Element k}}} \nu_{k,j} p_j\ , \tag{4.14}$$

wobei P_{H} der fiktive Partialdruck aller H-Kerne ist. $\nu_{k,l}$ ist die Anzahl der Atome des Elements k in dem Festkörper l pro Formeleinheit der Substanz, das für die Definition von f verwendet wird, und ϵ_l ist die Häufigkeit dieses Elements relativ zu H. $\nu_{k,j}$ ist die Anzahl der Atome des Elements k, die in dem Molekül j enthalten sind. Der Partialdruck p_j der Moleküle ist durch die Gleichung (4.11) gegeben. Der gesamte Druck ist gegeben durch

$$p = \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Moleküle } i}} p_i\ . \tag{4.15}$$

Die Gleichungen (4.14) und (4.15) und noch eine Gleichung der Art (4.12) für jeden Festkörper sind $K+1$ Gleichungen für die $K+1$ Unbekannten $p_{\mathrm{A}}, p_{\mathrm{B}}, p_{\mathrm{C}}...$ und P_{H}. Gesucht ist eine Lösung, die für jedes der Kondensate die Bedingungen

- $a = 1$ und $f \geq 0$,
- oder $f = 0$ und $a < 1$

Tabelle 4.2: Bei der Modellrechnung berücksichtigte Moleküle.

Element	Moleküle
H	H, H_2
C	C, CH_4, C_2, C_2H, C_2H_2
O	O, OH, H_2O, CO, CO_2
N	N, N_2, CN, HCN, NH_3, AlN
Si	Si, SiO, SiC, SiC_2, Si_2C, Si_2C_2, SiS, SiH
S	S, CS, HS, H_2S, AlS, FeS, CaS
Al	Al, AlO, AlOH, Al_2O, AlH, AlCl
Mg	Mg, MgO, MgH, MgS
Fe	Fe, FeO, $Fe(OH)_2$, FeH, AlFe, FeSi
Ca	Ca, CaOH, $Ca(OH)_2$, CaF, CaF_2
Na	Na, NaH, NaCl
Cr	Cr, CrH, CrO, CrO_2, CrO_3
Mn	Mn, MnO, MnH, MnS
K	K, KO, KH, KOH
Ti	Ti, TiO, TiO_2, TiC_2, TiC_4, TiS
V	V, VO, VO_2
Zr	Zr, ZrO, ZrC_2, ZrC_4, ZrCl, ZrS, ZrN
Cl	Cl, HCl, CaCl, $CaCl_2$, TiCl, TiOCl
F	F, HF, TiF, TiF_2, AlOF

erfüllt. Diese Gleichungen sollen für eine gegebene Temperatur T und gegebenen Druck P gelöst werden.

Wasserstoff H und Helium He sind bei einer normalen Elementmischung die beiden häufigsten Elemente. Deswegen kann das Problem des chemischen Gleichgewichts einer H-He-Mischung getrennt von allen anderen Elementen für sich allein gelöst werden.

Bei niedriger Temperatur und niedrigen Druck sind H, He und H_2 die häufigsten Teilchen in der Gasphase. Der Partialdruck p_{H} und die Hilfsgröße P_{H} werden aus den Gleichungen (4.14), (4.15) und (4.10) wie folgt berechnet:

$$p = p_{\mathrm{H}} + p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{H}_2) + p_{\mathrm{He}} \tag{4.16}$$

$$P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{H}} + 2p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{H}_2) \tag{4.17}$$

$$P_{\mathrm{H}}\epsilon_{\mathrm{He}} = p_{\mathrm{He}} \tag{4.18}$$

Die Lösung für p_{H} und P_{H} wird für alle anderen Elemente in den Gleichungen (4.14) verwendet.

Die Änderung der freien Enthalpie ΔG kann mit den Methoden der statistischen Mechanik aus den Bindungsenergien und Energiezuständen der Teilchen berechnet werden. In dieser Arbeit werden die Polynomapproximationen von Sharp und Hübner [1990] verwendet. Diese wurden für einige zusätzliche Moleküle durch Polynomapproximationen aus Tsuji [1973] ergänzt. Für einige Moleküle und Festkörper, die nicht in Sharp & Huebner gelistet sind, wurde die Polynomapproximation aus JANAF-Tabelle-Daten (Chase et al. [1985]) oder Barin ([1992]) berechnet. Die Ergebnisse für einige Fe-Si-Verbindungen sind in Anhang B gegeben. Die Tabelle 4.2 zeigt die im Modell berücksichtigten Moleküle.

4.2.3 Chemie der Gasphase

Im Folgenden wird die Zusammensetzung der Gasphase bei dem M-S-C Übergang untersucht, um die häufig auftretenden Moleküle, die für Kondensation und Wachstum des Staubs unter Nicht-Gleichgewichtsbedingung verantwortlich sein können, zu bestimmen.

In dieser Berechnung wurden 19 häufige Elemente und ihre ca. 100 häufigsten stabilen Moleküle berücksichtigt. Die Festkörper sind zuerst nicht einbezogen.

Die molekulare Zusammensetzung der Gasphase wurde bei einem Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} und in einem Temperaturbereich zwischen $600 \leq T \leq 1600$ K berechnet. Dieser Temperaturbereich und dieser Druck sind charakteristisch für die die Bedingungen, unter denen im Sternwind Roter Riesen Kondensation erwartet werden kann.

Die Abbildung (4.1) zeigt die Änderung der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Moleküle mit wachsender C/O-Häufigkeit in der Übergangsregion zwischen M- und C-Sternen für $T = 1000, 1200$ und 1600 K und einen Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2}. Die Abbildung (4.1) zeigt, dass für niedrige Temperaturen eine drastische Änderung der Zusammensetzung der Gasphase stattfindet, und zwar für die folgende kritische Kohlenstoffhäufigkeit:

$$\epsilon_{\mathrm{C,crit}} = \epsilon_{\mathrm{O}} - \epsilon_{\mathrm{Si}} + \epsilon_{\mathrm{S}} \,. \tag{4.19}$$

Für die in Tab. 4.1 gegebenen Elementhäufigkeiten entspricht dies

$$\frac{\epsilon_{\mathrm{C,crit}}}{\epsilon_{\mathrm{O}}} = 0.975 \,. \tag{4.20}$$

Für diese bestimmte C/O-Häufigkeit sind die Elemente C, O, Si, und S praktisch vollständig in CO, SiO und SiS gebunden. Für $\epsilon_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ existieren keine anderen häufigen Verbindungen dieser Elemente. Der Grund dafür ist die hohe Bindungsenergie dieser drei Moleküle (CO: 1076.5, SiO: 799.6, SiS: 623 kJ mol^{-1}, siehe auch Abb. (4.2)). Nur N_2 Moleküle (nicht in der Abb. zu sehen) haben eine vergleichbare Bindungsenergie (945.3 kJ mol^{-1}), so ist der Stickstoff fast vollständig in diesem Molekül gebunden.

Wenn die Kohlenstoffhäufigkeit unter der kritischen Häufigkeit $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ liegt, so steht ein Teil des Sauerstoffs zur Bildung sauerstoffhaltiger Moleküle zur Verfügung, während im umgekehrten Fall etwas Kohlenstoff übrig bleibt, welcher kohlenstoffhaltige

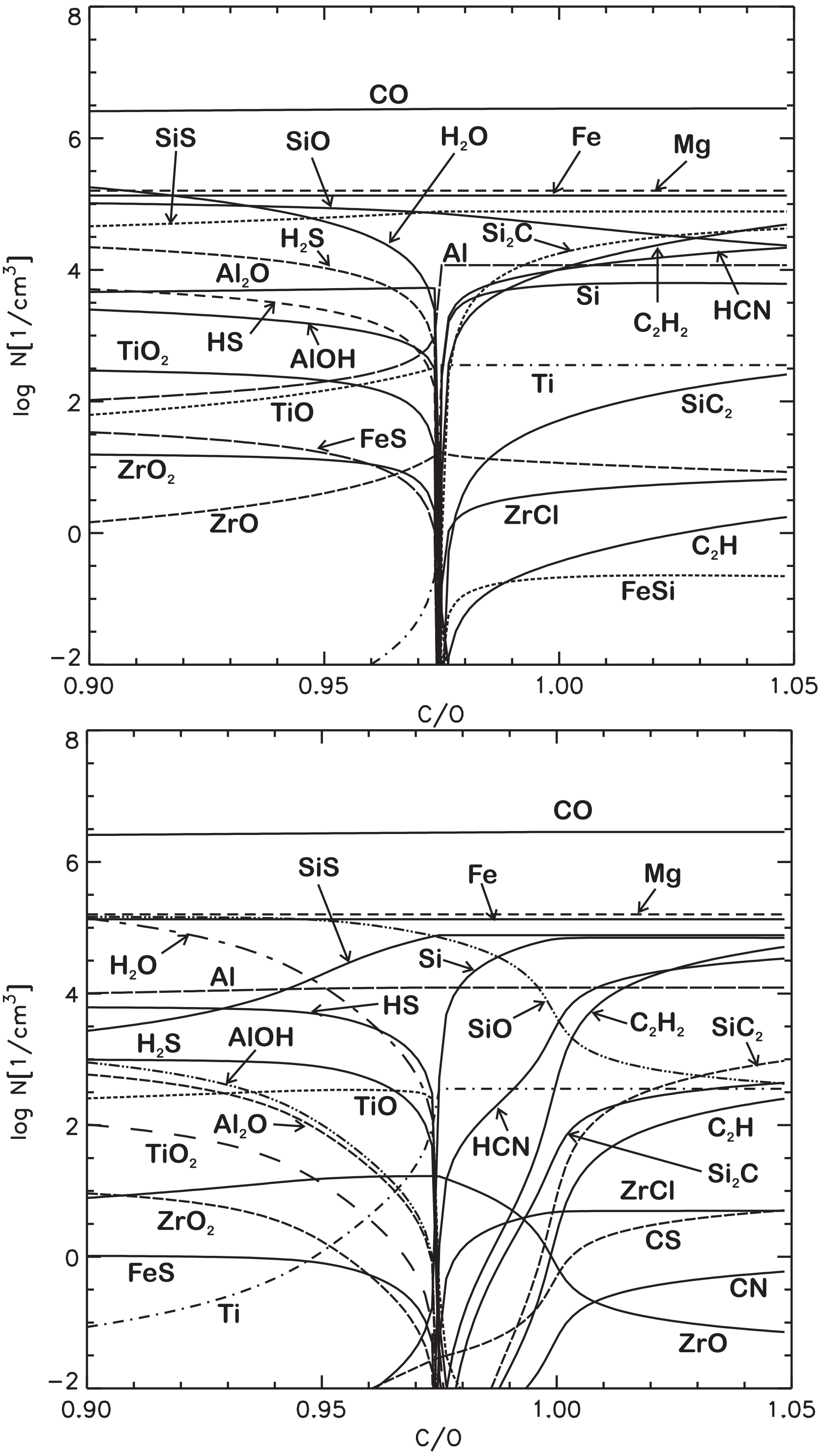

Abbildung 4.1 Änderung der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Moleküle mit wachsender C/O-Häufigkeit für $T = 1000$K (oben), $T = 1200$K (unten) und einen Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2}.

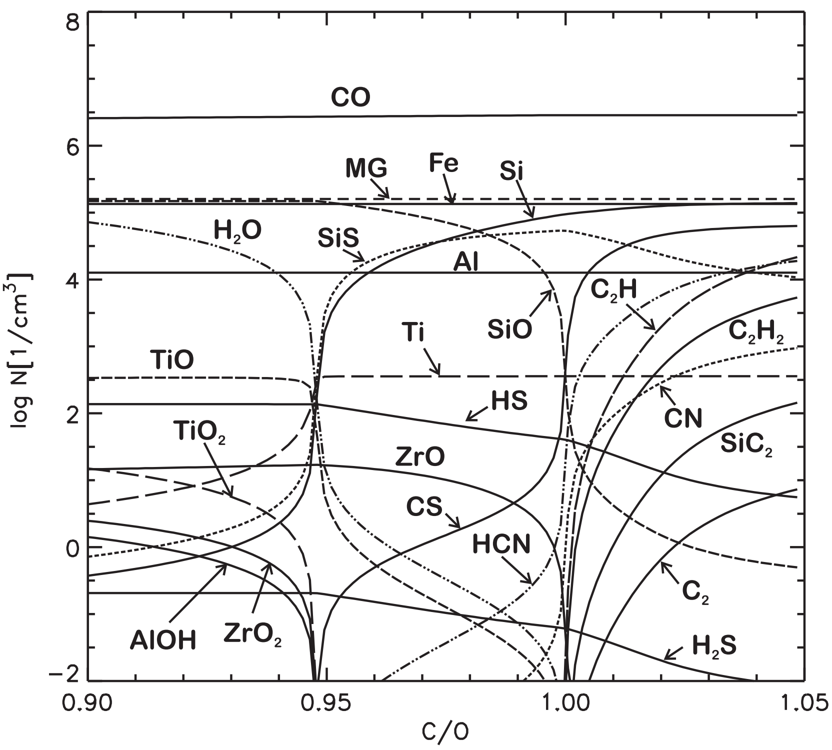

Abbildung 4.2 Änderung der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Moleküle mit wachsender C/O-Häufigkeit für $T = 1600$K und einen Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2}.

Moleküle bildet. Deshalb nähert sich mit ansteigendem $|\epsilon_C - \epsilon_{C,crit}|$ die Molekularzusammensetzung den Standardzusammensetzungen von M- oder C-Sternen an.

Für Temperaturen von ca. 1600 K findet die Änderung der Zusammensetzung der Gasphase in der Übergangsregion zwischen M- und C-Sternen nicht für $\epsilon_C = \epsilon_{C,crit}$, sondern für eine etwas niedrigere Kohlenstoffhäufigkeit von $\epsilon_C = \epsilon_O - \epsilon_{Si}$ (=0.948ϵ_O für die Elementhäufigkeiten gegeben in der Tab. 4.1 statt, wie man in Abb. (4.2) sehen kann.

Der Grund dafür ist die etwas niedrigere Bindungsenergie von SiS zu Vergleich mit CO und SiO. Die SiS Moleküle verschwinden oberhalb $T \approx 1600$ K. Dann ist das ganze Si in SiO gebunden bis zu der Temperatur, bei der SiO verschwindet.

Innerhalb der Sternenphotosphäre sind Temperatur und Druck sehr viel höher als in der Staubhülle. Die Änderung der Häufigkeiten einiger häufig vorkommender, wichtiger Moleküle, mit der Änderung des C/O-Verhältnisses, ist zum Vergleich aufgezeigt in Abb. (4.3) für $T = 2\,500$ K und $P = 10^2$ dyn cm^{-2}. Das entspricht genau den von Scalo [1974] aufgezeigten Ergebnissen. Der Übergang von Sauerstoff- zu Kohlenstoff-dominierter Chemie geschieht bei $\epsilon_C \approx \epsilon_O$. Der Wechsel der chemischen Zusammensetzung in der Sternenatmosphäre ereignet sich wesentlich sanfter als in der zirkumstellaren Kondensationszone und bei einem größeren Kohlenstoff:Sauerstoffanteil als in der Staubbildungsschicht.

Insbesondere verschwinden die letzten Sauerstoff tragenden Moleküle mit zunehmendem C/O-Anteil und die ersten Kohlenstoff tragenden Moleküle erscheinen in der Sternenatmosphäre innerhalb eines kleinen Intervalls (0.99 ... 1.01) des C/O-

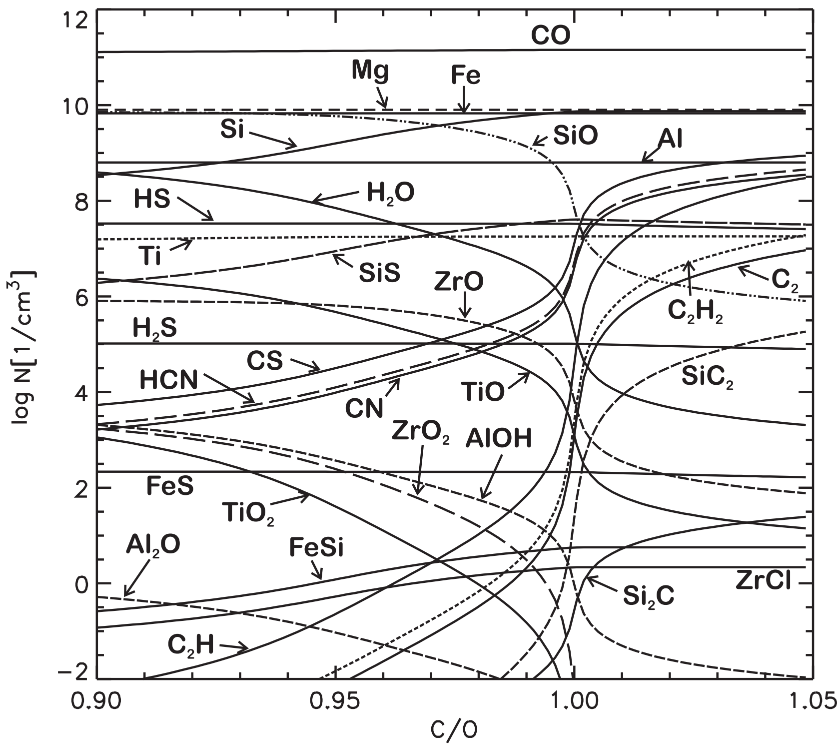

Abbildung 4.3 Änderung der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Moleküle mit wachsender C/O-Häufigkeit für $T = 2500$K und einen Druck von $P = 10^2$ dyn cm^{-2}.

Häufigkeitsverhältnis bei ca. $\epsilon_C = \epsilon_O$. Das gilt speziell für die diagnostisch wichtigen ZrO, C_2 und CN-Moleküle (Scalo & Ross[1976]). Der Bereich C/O= 0.99...1.01 ist der Bereich des C/O-Verhältnisses, wo Sterne als Spektraltyp SC klassifiziert werden. Liegen die C/O-Verhältnisse bei $\approx$ 0.95 zu $\approx$ 0.99, wird der Stern als Spektraltyp S bezeichnet aufgrund der Vorherrschaft von ZrO über TiO (Scalo & Ross[1976]). Für die S-Sterne gibt es offensichtlich einen Bereich im C/O-Verhältniss $\epsilon_{C,crit} \lesssim \epsilon_C \lesssim \epsilon_O$, bei dem die atmosphärische Zusammensetzung des Sterns nur etwas reduzierte Häufigkeiten der Sauerstoff tragende Moleküle aufweist und Kohlenstoff tragenden Moleküle noch nicht vorhanden sind, während die Chemie in der staubbildenen Schicht (insofern, als die Gleichgewichtschemie in diesem Bereich angewandt werden kann) definitiv kohlenstoffreicher Natur ist, wie das bei Sternen mit den Spektraleigenschaften von Kohlenstoffsternen der Fall ist.

4.3 Kondensation im chemischen Gleichgewicht

Die Diskussion bezüglich Staubkondensation in der Ausströmung von S-Sternen beginnt mit der Behandlung des Themas Gleichgewichtskondensation für die Elementmischung in S-Sternen wie in Tabelle 4.1 definiert. Diese Mischung unterscheidet sich von der kohlenstoff- oder sauerstoffreichen Elementmischung, für welche in astrophysikalischen Zusammenhängen das Festkörper-Gas-Phasen-Gleichgewicht diskutiert wurde: Grossman [1972], Lattimer, Schramm & Grossman [1978], Saxena & Ericksson [1986], Sharp & Huebner [1990], Lodders & Fegley [1995], Sharp & Wasserburg [1995], nur um einige der vielen Abhandlungen zu diesem Thema zu nennen.

Für weitere Referenzen zu dem Thema Gleichgewichts-Studien s. Lodders & Fegley [1997, 1999].

Die Staubbildung bei der Entwicklung der Sterne ist ein Prozeß, der unter Bedingungen stattfindet, die weit von thermischen Gleichgewichtsbedingungen entfernt sind. Man kann nicht erwarten, dass genau die Festkörpermischung in deren Umgebung kondensiert, wie sie sich aus der Gleichgewichtschemie ergibt. Kondensationstemperaturen in der Ausströmung können erheblich von den Kondensationstemperaturen im chemischen Gleichgewicht abweichen. Nichtsdestotrotz ist es sehr aufschlussreich, die möglichen Kondensate und ihre Stabilitätsgrenzen durch solche Betrachtungen zu bestimmen, da dies hilft, die wenigen Festkörper, die aller Voraussicht nach aufgrund ihrer Stabilität bis zu sehr hohen Temperaturen in der vorgegebenen Umgebung kondensieren, herauszufinden.

Gleichgewichtsberechnungen und Beobachtungen zeigen, dass Silikatverbindungen die häufigsten Staubverbindungen in den sauerstoffreichen Sternen bilden und Kohlenstoffverbindungen die häufigsten in kohlenstoffreichen Sternen. Einen Eindruck, wie die Beschaffenheit der Kondensate beim Übergang von M- zu C-Sternen wechselt, kann man sich bei Gilman [1969] und Lodders & Fegley [1995] verschaffen. Wir betrachten nun im folgenden die Stabilitätsgrenzen und Gleichgewichtshäufigkeiten der wichtigen Staubspezies in dem Übergangsbereich zwischen M- und C-Sternen, in dem das Kohlenstoff- und Sauerstoffmengenverhältnis von C/O<1 zu C/O>1 wechselt.

In den unten aufgezeigten Berechnungen untersuchen wir die mögliche Kondensation von 90 Festkörpern unter konstanten Druckverhältnissen $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2} bei einer Temperatur von $600 \leq \mathrm{T} \leq 1600$ K. Die thermodynamischen Daten für diese Substanzen entstammen der JANAF-Tabelle (Chase et al. [1985]), Barin [1992] und Kubaschewski und Alcock [1983].

Die in der Berechnung berücksichtigten Moleküle sind in der Tabelle 4.2 aufgelistet. Die betrachteten Substanzen wurden nach folgenden Kriterien ausgewählt: (i) Der großen Elementenhäufigkeit der Elemente, aus denen sie gebildet sind, und (ii) einer hohen Verdampfungs-oder Sublimationstemperatur.

4.3.1 Kondensation von Silikaten im $\epsilon_\mathrm{C} < \epsilon_\mathrm{C,crit}$ Bereich

In einer sauerstoffreichen Umgebung, korrespondierend mit Kohlenstoffhäufigkeiten unterhalb der kritischen Kohlenstoffhäufigkeit, $\epsilon_\mathrm{C,crit}$, definiert durch (4.19), sind Olivin mit der Zusammensetzung $Mg_{2x}Fe_{2(1-x)}SiO_4$ $(0 \leq x \leq 1)$, Pyroxen mit der Zusammensetzung $Mg_xFe_{1-x}SiO_3$ $(0 < x \leq 1)$ und metallisches Eisen die stabilsten Verbindungen, welche nur die häufigsten Refraktären-Elemente enthalten. Von warmem Staub dieser Art ausgehende Strahlung dominiert die Infrarot-Emission aus den Staub-Hüllen um M-Sterne. Die Berechnung der Zusammensetzung heterogener Gleichgewichte zeigt, dass in den M-Sternen die stabilsten Verbindungen, die aus den häufigen Elementen C, N, O, Mg, Si, S, Fe bis zur Grenze $\epsilon_\mathrm{C,crit}$ gebildet werden, vorkommen, wenn auch mit einigen bedeutenden Veränderungen in Bezug auf den Kondensationsgrad. Es werden nachfolgend die Details in der Übergangsregion betrachtet.

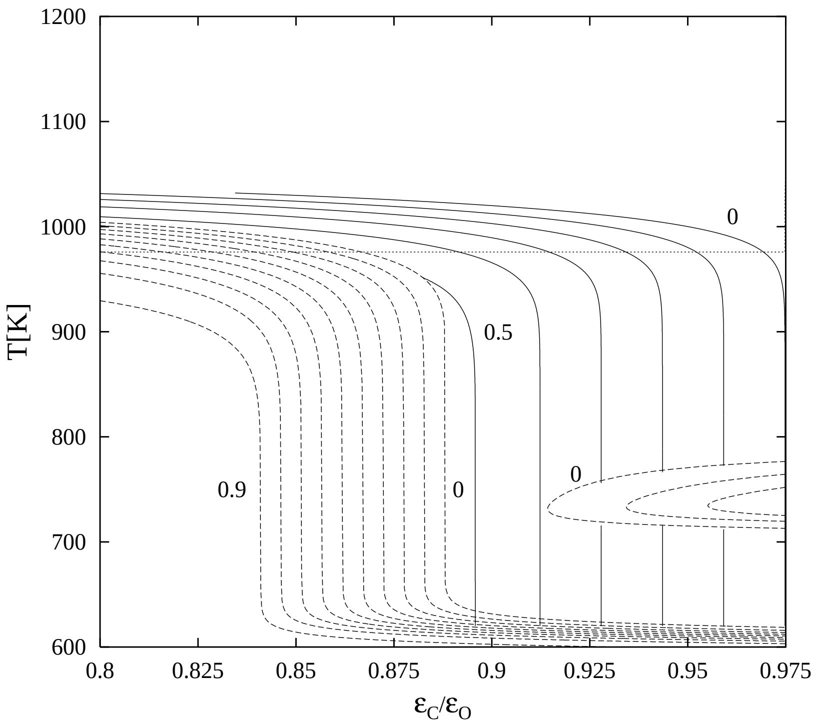

Abbildung 4.4 Gleichgewichtskondensation für Forsterit (durchgezogene Linie), Enstatit (gestrichelte Linie) und metallisches Eisen (punktierte Linie) für $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} für variierende C/O-Verhältnisse.

Im chemischen Gleichgewicht sind die Silikate nahezu eisenfrei (vergl. Saxena & Ericksson [1986]), außer bei niedrigen Temperaturen $T \lessapprox 500$ K, unter welchen in zirkumstellaren Hüllen kein chemisches Gleichgewicht existiert. Der Einfachheit halber wurden in den Berechnungen ausschließlich die eisenfreien Bestandteile Forsterit (Mg_2SiO_4) und Enstatit ($MgSiO_3$) berücksichtigt. In M-Sternen kondensiert Forsterit bei einer geringfügig höheren Temperatur als Enstatit (Gail & Sedlmayr [1999]). Dies bestätigt sich ebenso in der Übergangsregion bis zu der kritischen Kohlenstoffhäufigkeit $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}$, wenn sich ϵ_{C} von unten an ϵ_{O} annähert. Die Abbildung (4.4) zeigt das Ergebnis einer Gleichgewichtsrechnung zwischen Forsterit, Enstatit und der Gasphase, ohne jedoch andere Feststoffe zu berücksichtigen. Insbesondere zeigt (4.4) die Abhängigkeit des Kondensationsgrades von Forsterit und Enstatit von dem C/O-Häufigkeitsverhältnis in der für S-Sterne maßgeblichen Übergangsregion. In der Region, in welcher Forsterit und Enstatit nebeneinander existieren, sind der Klarheit halber nur die Stabilitätslinien von Enstatit dargestellt. Das Verhalten der Stabilitätslinien von Forsterit ist komplex und für die weitere Diskussion ohne Relevanz.

Bis zu einer Kohlenstoffhäufigkeit von

$$\epsilon_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{O}} - 3\epsilon_{\mathrm{Si}} \tag{4.21}$$

($\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}}$=0.844 für die in Tabelle 4.1 beschrieben Elementzusammensetzung) findet man gewöhnlich folgendes Bild: Olivin kondensiert zuerst und sein Kondensationsgrad steigt schnell mit Abnahme der Temperatur, bis das verfügbare Magnesium nahezu vollständig in Forsterit gebunden ist. Hierdurch wird wegen $\epsilon_{\mathrm{Si}} \approx \epsilon_{\mathrm{Mg}}$ nur die Hälfte des verfügbaren Si konsumiert. Bei niedrigeren Temperaturen konvertiert Forsterit zu Enstatit bis das Si vollständig in Enstatit und einigem Forsterit gebunden ist. Bis zu einer durch (4.21) definierten Kohlenstoffhäufigkeit kann der Silikatstaub wie in Standard-M-Sternen gebildet werden. Dies entspricht Sternen, die -gemäß ihrer Spektra- als normale M-Sterne oder höchstens als milde MS-Sterne zu klassifizieren wären (Scalo & Ross [1976]).

Für Kohlenstoffhäufigkeiten, die die Grenze (4.21) überschreiten, reicht der verfügbare Sauerstoff (d.h. der Überschuß von O gegenüber C) nicht aus, um den Teil des Si, das nicht in Forsterit gebunden werden kann, in dem weniger stabilen mineralischen Enstatit zu fixieren. Mit steigendem Kohlenstoff/Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnis kondensiert ein abnehmender Teil des Si zu Enstatit. Bei einer Kohlenstoffhäufigkeit oberhalb

$$\epsilon_{\rm C} = \epsilon_{\rm O} - 2\epsilon_{\rm Mg} \tag{4.22}$$

($\epsilon_{\rm C}/\epsilon_{\rm O}$=0.888 ist für die in Tabelle 4.1 beschrieben Elementzusammensetzung) ist der verfügbare Sauerstoff auf ein solches Maß reduziert, dass die Bildung von Forsterit nicht mehr durch die Magnesiumhäufigkeit begrenzt wird. Dann wird kein Enstatit sondern nur das stabilste Silikatmineral Forsterit in dem Häufigkeitsintervall zwischen der durch (4.22) gegebenen unteren Grenze und der oberen Grenze $\epsilon_{\rm C,crit}$ gebildet, mit Ausnahme des in Abb.(4.4) gezeigten kleinen Bereichs, in welchem $MgSiO_3$ stabil ist. Das überschüssige Magnesium, welches nicht zur Silikatbildung benötigt wird, bildet dann eine andere feste Verbindung, welche sich als MgS herausstellt.

Der Sauerstoff, der in CO gebunden ist, steht für die Bildung von Silikaten nicht zur Verfügung. Der Grund dafür ist die hohe Bindungsenergie des CO-Moleküls. Nur bei ziemlich niedriger Temperatur sind netto Reaktionen der Art

$$\mathrm{Si} + 2\mathrm{Mg} + 4\mathrm{CO} + 2\mathrm{H_2} \longrightarrow \mathrm{Mg_2SiO_4(fest)} + 2\mathrm{C_2H_2}$$

thermodynamisch günstig. Das ist für die Kondensation von Si in Forsterit und Enstatit im chemischen Gleichgewicht bei niedriger Temperatur auf der kohlenstoffreichen Seite ($\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm crit}$) verantwortlich. Die Bildung von Silikaten würde, sofern dies kinetisch möglich ist, in dem stellaren Wind in einer Region auftreten, in welcher die Kondensation von Silikaten, Kohlenstoff oder anderem Staubmaterial den Wind bereits auf hohe Überschall-Ausflußgeschwindigkeiten beschleunigt hat. Die daraus resultierende schnelle Verdünnung des Windmaterials in dieser Region und die sich ergebende geringere Teilchendichte machen die Bildung von sauerstoffhaltigen Teilchen unwahrscheinlich, da die Wachstumszeitskala zu lang wird. Dieser Effekt wird in Kapitel 5 eingehender diskutiert.

4.3.2 Kondensation von Eisen und Eisenverbindungen

Solange die Temperatur höher als 500 K ist und die Kondensation im Gleichgewicht stattfindet (siehe Gail & Sedlmayr [1999] für den Fall der Nicht-Gleichgewichtskondensation), ist das häufige Eisen (bis auf einen kleinen Anteil) nicht in den Silikaten eingebunden. Aus den vielen Untersuchungen der Kondensationssequenzen ist bekannt, dass im chemischen Gleichgewicht das Eisen als freies Metall kondensiert.

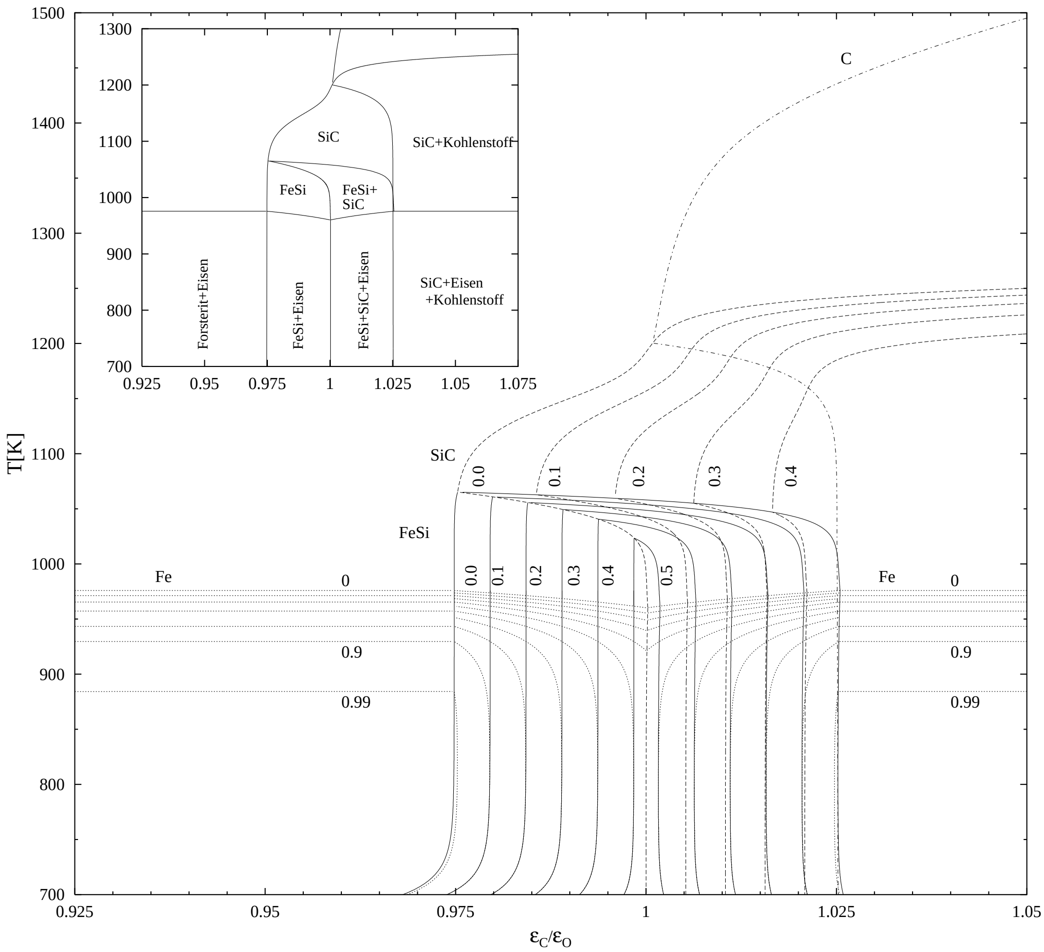

Abbildung 4.5 Gleichgewichtskondensation für FeSi (durchgezogene Linie), festes Eisen (gepunktete Linie) und Siliziumkarbid (gestrichelte Linie) für $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} und für variierende C/O-Verhältnisse.

Die Abbildung (4.4) zeigt für einen typischen Druck von $P = 10^{-4}\,\mathrm{dyn\,cm^{-2}}$ die obere Stabilitätsgrenze von Fe bei verschiedenen Kohlenstoff-Sauerstoff-Verhältnissen als gepunktete Linie. Bei einem niedrigen Druck, der in zirkumstellaren Hüllen vorherrscht, ist die Kondensationstemperatur geringer als die der Silikate. Solange $\epsilon_\mathrm{C} \lesssim \epsilon_\mathrm{C,crit}$ hängt diese Kondensationstemperatur nicht von dem Kohlenstoff-Sauerstoff-Verhältnis ab. Nahe der kritischen Kohlenstoffhäufigkeit $\epsilon_\mathrm{C,crit}$ fällt die Kondensationstemperatur von Forsterit unter die von Eisen, da der frei verfügbare Sauerstoff aus der Gasphase verschwindet. Bei niedrigen Temperaturen würde sich das Eisen in FeS und in einer sauerstoffreichen Umgebung auch in Eisenoxide umwandeln, wie in vielen Rechnungen der Kondensationssequenzen gezeigt wurde. In Gail & Sedlmayr [1998a] wird gezeigt, dass diese Umwandlungen aus kinetischen Gründen unter zirkumstellaren Bedingungen unwahrscheinlich sind. Aus diesem Grund werden FeS und Eisenoxide nicht berücksichtigt.

4.3.3 Kondensation in dem Übergangsbereich zwischen $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ und $\epsilon_{\mathrm{C}} \approx 1.025\epsilon_{\mathrm{O}}$

Bei Kohlenstoffhäufigkeiten im Bereich zwischen der kritischen Kohlenstoffhäufigkeit $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ und einer Kohlenstoffhäufigkeit, die ein wenig über der Sauerstoffhäufigkeit liegt, wird die Chemie durch einen Mangel von Sauerstoff wie auch Kohlenstoff charakterisiert, um die in den Staubhüllen von M-Sternen charakteristischen Silikate und den in den Staubhüllen von C-Sternen charakteristischen Ruß zu bilden. Die Abbildung (4.5) zeigt die in diesem Bereich der Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnisse aus den häufigsten Elementen gebildeten Kondensate. Diese sind: Eisen, Siliziumkarbid und Eisensilizide.

In den Berechnungen der Kondensation im chemischen Gleichgewicht sind einige Bestandteile enthalten, die nicht in den früher veröffentlichten Kondensationsrechnungen enthalten sind, nicht einmal in dem umfassenden Satz von Festkörpern, die in Fegley & Lodders [1994] aufgelistet sind. FeSi, $FeSi_2$ und Fe_3Si_7 war eine Gruppe, die darauf geprüft wurde, in zirkumstellaren Staubhüllen zu kondensieren. Es stellte sich heraus, dass das Eisensilizid FeSi bei einer Kohlenstoffhäufigkeit über $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ im chemischen Gleichgewicht stabiler als reines Eisenmetall ist. Für die Elementmischung in S-Sternen wurde die mögliche Existenz dieses festen Kondensats in der Vergangenheit nicht berücksichtigt. Durch die Identifikation einiger der fernen Infrarotabsorptionsbanden von FeSi mit beobachteten, jedoch bisher nicht identifizierten Festkörperabsorptionsbanden (Ferrarotti et al. [2000]), wurde vor kurzem gezeigt, dass dieses feste Material in zirkumstellaren Hüllen von Sternen mit bestimmten Elementhäufigkeiten und abgestoßenen Staubhüllen möglicherweise existiert. Aus Kondensationsrechnungen für C-Stern-Elementmischungen wurde bereits kürzlich die mögliche Existenz von FeSi von Lodders & Fegley [1999] entdeckt.

Die Abbildung (4.5) zeigt für den Kohlenstoffhäufigkeitsbereich von $\epsilon_{\mathrm{C,crit}} \lessapprox \epsilon_{\mathrm{C}} \lessapprox 1.025\epsilon_{\mathrm{O}}$ den Kondensationsgrad der häufigen Staubarten im chemischen Gleichgewicht. In dieser Rechnung wird fester Kohlenstoff nicht berücksichtigt, da er in diesem Bereich kein bedeutendes Kondensat darstellt (siehe Abb. (4.6) für Kohlenstoffkondensation). Die Abbildung zeigt festes FeSi als sehr häufige Staubart. Seine obere Stabilitätsgrenze tritt auf, wenn SiC beginnt, fast das gesamte Si aufzubrauchen. Seine Kondensationstemperatur ist sogar höher als das von festem Eisen. Die Eisensilizide existieren im chemischen Gleichgewicht nur bei Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnissen, die für SC- und extreme S-Sterne ($\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}} \gtrapprox 0.975$) typisch sind. Dies muss jedoch nicht für die Nicht-Gleichgewichtskondensation gelten.

Das Siliziumkarbid beginnt ebenfalls bei Kohlenstoffhäufigkeiten $\epsilon_{\mathrm{C}} > \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ bei Temperaturen oberhalb der Stabilitätsgrenze von FeSi zu kondensieren. Bei Kohlenstoffhäufigkeiten im Bereich $\epsilon_{\mathrm{C,crit}} < \epsilon_{\mathrm{C}} < \epsilon_{\mathrm{O}}$ verschwindet es wieder, sobald FeSi stabil wird. Siliziumkarbid ist in diesem Bereich, wenn überhaupt, möglicherweise kein bedeutendes Kondensat, da in diesem Bereich der Kohlenstoffhäufigkeit im chemischen Gleichgewicht der maximale Kondensationsgrad von Si in SiC gering ist.

Bei Kohlenstoffhäufigkeiten im Bereich $\epsilon_{\mathrm{O}} < \epsilon_{\mathrm{C}} \lessapprox 1.025\epsilon_{\mathrm{O}}$ existieren im chemischen Gleichgewicht Siliziumkarbid und Eisen gemeinsam, und es ist möglich, dass beide Staubarten in einer Staubhülle entstehen. Das bedeuted, dass Eisensilikate auch in Kohlenstoffsternen mit sehr geringem Kohlenstoffüberschuss vorhanden sein könnten.

Bei Kohlenstoffhäufigkeiten über $\approx 1.025\epsilon_O$ existiert unter der Bedingung chemischen Gleichgewichts kein Eisensilikat. In diesem Bereich kondensiert das Eisen wie im sauerstoffreichen Bereich als freies Metall, während Silizium mit Kohlenstoff festes SiC bildet.

Kohlenstoff wird im chemischen Gleichgewicht bei Temperaturen oberhalb der Stabilitätsgrenze von Siliziumkarbid (siehe Abb. (4.5) und auch Abb. (4.6)) stabil, wenn $\epsilon_C/\epsilon_O > 1$ ist. Im Bereich $1 < \epsilon_C/\epsilon_O \lesssim 1.025$ verschwindet der Kohlenstoff wieder, sobald SiC stabil wird. Der Anteil des gesamten Kohlenstoffs, der in festen Kohlenstoff kondensiert, ist sehr gering (siehe Abb. (4.6)), und Kohlenstoff ist in SC-Sternen mit Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnissen von $1 < \epsilon_C/\epsilon_O \lesssim 1.025$ vielleicht keine bedeutende Staubart.

Die Mischung der Festkörper, die in der Übergangszone zwischen sauerstoffreicher und kohlenstoffreicher Elementmischung existieren, hängt kritisch von den C- und O-Häufigkeiten und der Temperatur ab. In Abbildung (4.5) kann man acht Bereiche unterscheiden, in denen unterschiedliche Mineralmischungen existieren:

1. Eisen und Forsterit
2. Eisen und Eisen-Silizide
3. Eisen, Eisen-Silizide und Siliziumkarbid
4. Eisen, Siliziumkarbid und Kohlenstoff
5. Eisen-Silizide
6. Eisen-Silicide und Siliziumkarbid
7. Siliziumkarbid
8. Siliziumkarbid und Kohlenstoff.

Die Existenzbereiche für variable C/O-Häufigkeitsverhältnisse und Temperaturen im Übergang von M- zu C-Sternen werden für jede der verschiedenen Mineralmischungen in der linken oberen Ecke von Abb. (4.5) gezeigt. Diese Vielfalt möglicher Mineralzusammensetzungen machen S-Sterne zu einer besonders interessanten Sternklasse, in deren Staubhüllen sehr unterschiedliche Staubmischungen vorkommen könnten.

4.3.4 Kondensation im kohlenstoffreichen Bereich

Das kohlenstoffreiche Gebiet wird durch das Vorhandensein vieler Kohlenstoff enthaltender Moleküle in der Gasphase, die von CO verschieden sind, charakterisiert. Wie gut bekannt ist, muss $\epsilon_C > \epsilon_O$ sein, wie auch durch Betrachtung von Abb. (4.1) zu sehen ist. Bei niedriger Temperatur geschieht die Änderung in der Zusammensetzung der Gasphase ziemlich abrupt bei $\epsilon_C = \epsilon_{C,\mathrm{crit}}$, wie in den beiden Abb. (4.1), entsprechend der Temperaturen $T = 1\,000$ K und $T = 1\,200$ K, gezeigt, und gemäßigter bei $\epsilon_C = \epsilon_O$ bei höheren Temperaturen, wie in Abb. (4.3) ($T = 2\,500\,\mathrm{K}$) gezeigt. Für das Problem der Staubbildung ist die Zusammensetzung bei niedrigen

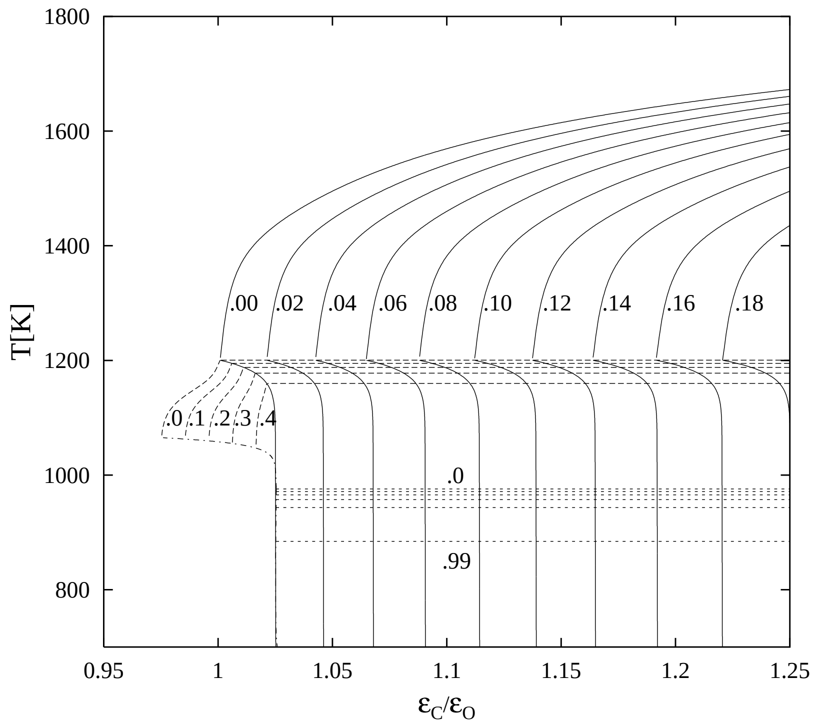

Abbildung 4.6 Gleichgewichtskondensation für Kohlenstoff (durchgezogene Linie), Siliziumkarbid (gestrichelte Linie) und Eisen (gepunktete Linie) für $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} und für variierende C/O-Verhältnisse.

Temperaturen relevant, während die Zusammensetzung bei höheren Temperaturen das ist, was man im Sternspektrum erkennen kann.

Die Abbildung (4.6) zeigt im kohlenstoffreichen Bereich den Kondensationsgrad der häufigen Elemente in Festkörper, wie er im chemischen Gleichgewicht berechnet wurde. In diesem Bereich der C/O-Häufigkeitsverhältnisse sind die häufigen Staubarten fester Kohlenstoff, SiC und Eisen. Bei etwa 800 K würde zusätzlich MgS kondensieren (nicht in der Abb. gezeigt und nicht in dieser Arbeit diskutiert). Der Übergang zu einer Mischung, die für kohlenstoffreiches Material charakteristisch ist, tritt bei einer Kohlenstoffhäufigkeit von $\epsilon_C \approx 1.025\epsilon_O$ und nicht $\epsilon_C = \epsilon_O$ auf. Fällt die Kohlenstoffhäufigkeit eines Sterns in das Intervall $\epsilon_O < \epsilon_C \lesssim 1.025\epsilon_O$, kann die Staubzusammensetzung anders sein, als bei einem C-Stern erwartet, obwohl das Sternspektrum wie das eines C-Sterns aussehen würde.

In dieser Arbeit wird das Problem der Staubbildung in wahren C-Sternen nicht betrachtet.

4.4 Nukleation

Obwohl es nicht beabsichtigt ist, das Problem der Nukleation in dieser Arbeit zu diskutieren, möchten wir einige grobe Schätzungen über die Möglichkeit abgeben, dass Keime für das Staubwachstum durch weniger häufiger Elemente gebildet werden, als die, die den zirkumstellaren Staub bilden. Abbildung (4.7) zeigt die Stabilitätsgrenzen für die stabilen Oxide und Karbide von Titan und Zirkon in Äbhängigkeit vom

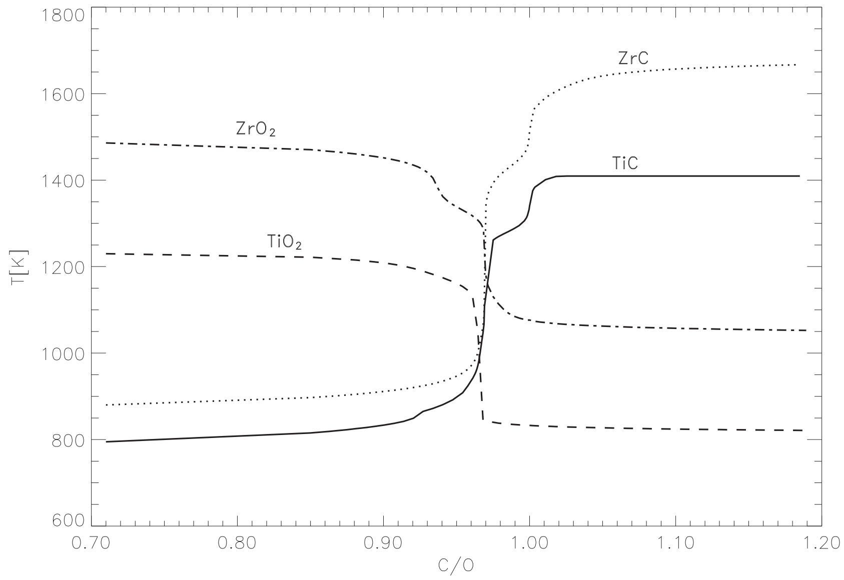

Abbildung 4.7 Stabilitätsgrenze der für die Nukleation wichtigsten Kondensate, bei einem Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2}.

C/O-Verhältnis (vergl. ebenfalls Lodders & Fegley [1995]). Die Häufigkeit von Zr in Abbildung (4.7) ist bereits um den Faktor 10 über die kosmischen Standarhäufigkeiten erhöht, um die Zunahme der *s*-Prozeß-Elemente nach Beginn des *„third dredge up“* zu berücksichtigen. Die Abbildung zeigt, dass auf der sauerstoffreichen Seite ($\epsilon_{\rm C} < \epsilon_{\rm C,crit}$) die Zirkon- und Titanoxide bis zu wesentlich höheren Temperaturen als die Silikate stabil sind, während auf der kohlenstoffreichen Seite die Karbide von Zr und Ti bei höheren Temperaturen stabiler als fester Kohlenstoff und SiC sind, zumindest bei geringer Kohlenstoffhäufigkeit. Berücksichtigt wurden hier nicht die wahren Kohlenstoffsterne $\epsilon_{\rm C} > 1.025\epsilon_{\rm O}$ (s. hierzu z.B. Lodders & Fegley [1995, 1997, 1999]). Was die S-Sterne auf der kohlenstoffreichen Seite anbelangt, sind die Karbide von Ti und Zr bis zu wesentlich höheren Temperaturen stabil als mögliche Kondensate häufiger Elemente (Fe, FeSi, SiC). Somit, abgesehen von einer kleinen, unwesentlichen Übergangsregion im C/O-Verhältnis bei $\epsilon_{\rm C} = \epsilon_{\rm C,crit}$, könnten Feststoffe von Ti und Zr Keime für das Wachstum von zahlreichen Staubspezies bilden. Jedoch scheint Zirkon auch bei erhöhter Häufigkeit kein geeigneter Kandidat für die Keimbildung zu sein, während die Häufigkeit von Ti aber hoch genug ist, um dies zu ermöglichen.

Aus Laboruntersuchungen präsolarer Staubteilchen (Bernatowicz et al. [1996]) ist bekannt, dass zumindest teilweise Kohlenstoffteilchen um Keim aus TiC oder (Zr,Mo)C wachsen. Gail & Sedlmayr [1998b] schlagen vor, dass in einer sauerstoffreichen Umgebung das Staubwachstum an TiO_2-Kernen stattfinden könnte. Auf der Basis eines einfachen Modells der Eigenschaften von TiO_2-Clustern wurde gezeigt, dass TiO_2-Nukleation bei einer Temperatur von etwa 50 K über der Stabilitätsgrenze der Silikate stattfindet. Detailiertere Rechnungen, die auf quantenmechanischen Berechnungen der Strukturen und Bindungsenergien von TiO_2-Clustern basieren, haben dies bestätigt (Jeong [2000]).

Hier wird kurz die Möglichkeit der Bildung von TiO_2-Keimen in der sauerstoffreichen Elementmischung diskutiert. Die Gleichung für das Wachstum von TiO_2-Clustern lautet

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0\, n_{\mathrm{TiO_2}} v_{\mathrm{th}}\, \alpha \,. \tag{4.23}$$

a ist der Radius der Teilchen und $n_{\mathrm{TiO_2}}$ ist die Teilchendichte der $\mathrm{TiO_2}$ Moleküle. Das Volumen, das $\mathrm{TiO_2}$ im Festkörper einnimmt, ist

$$V_0 = \frac{A_{\mathrm{TiO_2}}\, m_{\mathrm{H}}}{\rho_{\mathrm{TiO_2}}} \,. \tag{4.24}$$

$A_{\mathrm{TiO_2}} = 79.87$ ist das Molekulargewicht des $\mathrm{TiO_2}$ und $\rho_{\mathrm{TiO_2}} = 4.23\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ist die Massendichte des kondensierten Festkörpers. $v_{\mathrm{th}} = 3.2\,10^4\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ ist die mittleren thermische Geschwindigkeit des $\mathrm{TiO_2}$ Moleküls bei $T = 1000$ K und α ist der Stickingkoeffizient, für welchen man $\alpha = 1$ annimmt, da bereits der Monomer ein drei-atomiges Molekül ist. [1] Die zum Anwachsen auf einen vorgegebenen Radius a_{sn} des Keims erforderliche Zeit beträgt

$$t_{\mathrm{gr}} = a_{\mathrm{sn}} \left| \frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} \right|^{-1} \,. \tag{4.25}$$

Wenn das Wachstum über eine einer Änderung ΔT in der Temperatur des Windmaterial entsprechende Distanz Δr erfolgt, hat man

$$\frac{\Delta r}{r} = 2\frac{\Delta T}{T} \,. \tag{4.26}$$

da die Temperatur annähernd wie $T(r) \propto r^{-1/2}$ variiert (graue Temperaturverteilung). Mit $\Delta T \approx 50\,\mathrm{K}$, welches der Temperaturdifferenz zwichen der $\mathrm{TiO_2}$ Nukleation und der Stabilitätsgrenze den Silikate entspricht, $T \approx 1\,000\,\mathrm{K}$, $r \approx 4.5R_* \approx 10^{14}\,\mathrm{cm}$ haben wir $\Delta r \approx 1\,10^{13}\,\mathrm{cm}$. Die verfügbare Zeit für das Keimwachstum ist

$$t_{\mathrm{hydr}} = \frac{\Delta r}{v} \,. \tag{4.27}$$

Die Strömungsgeschwindigkeit v vor dem Beginn der schnellen Beschleunigung durch die Kondensation der häufigen Staub Spezies sollte etwa gleich der Schallgeschwindigkeit $v \approx 10^5\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ sein. Dann ist $t_{\mathrm{hydr}} \approx 10^8\,\mathrm{s}$. Das ist die verfügbare Zeit für das Keimwachstum.

Damit $t_{\mathrm{gr}} < t_{\mathrm{hydr}}$, muss man

$$n_{\mathrm{TiO_2}} \geq \frac{a_{\mathrm{sn}}}{V_0 v_{\mathrm{th}} \alpha t_{\mathrm{hydr}}} \tag{4.28}$$

haben. Für einen - beispielsweise - 1000 $\mathrm{TiO_2}$ Moleküle enthaltenden Keim haben wir $a_{\mathrm{sn}} = 10 V_0^{\frac{1}{3}} = 3\,10^{-7}\,\mathrm{cm}$. Dann benötigen wir $n_{\mathrm{TiO_2}} \geq 3\,10^3\,\mathrm{cm^{-3}}$. Das ist die für ein effizientes Keimwachstum benötigte Mindestteilchendichte der $\mathrm{TiO_2}$ Moleküle.

Die Anzahldichte von Wasserstoffkernen in einem stationären Wind ist

$$\begin{aligned} N_{\mathrm{H}} &= \frac{\dot{M}}{4\pi m_{\mathrm{H}}} \frac{1}{r^2 v} \qquad (4.29) \\ &= 3 \cdot 10^{10} \left(\frac{\dot{M}}{10^{-5} M_\odot\, \mathrm{yr}^{-1}} \right) \left(\frac{10^{14}\mathrm{cm}}{r} \right)^2 \left(\frac{\mathrm{km\,s^{-1}}}{v} \right) . \end{aligned}$$

[1] Die Wahrscheinlichkeit einer Anlagerung nimmt mit der Zahl der inneren Freiheitsgrade der Stoßpartner nach der Theorie von Kassel, Rice und Ramsperger (siehe Laidler [1963]) stark zu und wird ab ca. 6 beteiligten Atome ≈ 1.

Bei einer Temperatur von $\approx 1\,000\,\mathrm{K}$ ist für die sauerstoffreiche Mischung das Titan fast vollständig in TiO_2-Molekülen gebunden. Mit der in Tab. 4.1 angegebenen Häufigkeit ist $n_{\mathrm{TiO_2}} \approx 3\,10^3\,\mathrm{cm}^{-3}$. Wird dies mit der vorherigen Bedingung $n_{\mathrm{TiO_2}} \geq 3\,10^3\,\mathrm{cm}^{-3}$ verglichen, kommt man zu dem Schluss, dass das Wachstum von TiO_2-Keimen mit mindestestens 10^3 Monomeren möglich ist, wenn $\dot{M} \gtrsim 10^{-5}\,M_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ist, und das Wachstum sehr kleiner Keime mit mindestens 10 Monomeren, was Clustern mit 30 Atomen entspricht, wenn $\dot{M} \gtrsim 2\,10^{-6}\,M_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ist.

So geht in der sauerstoffreichen Elementmischung ($\epsilon_\mathrm{C} < \epsilon_\mathrm{C,crit}$) der Bildung der häufigen Staubbestandteile Bildung und Wachstum von TiO_2-Clustern voran. Diese können als Wachstumszentren für die Kondensation der häufigen Staubbestandteile dienen. Aufgrund der geringeren Häufigkeit von Zr ist die Situation für Keime, die sich aus ZrO_2 bilden, weniger günstig. Bei den höchsten Massenverlustraten $\dot{M} \gtrsim 10^{-5}\,M_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ können sich in dem stellaren Wind jedoch auch Keimteilchen aus Zirkonoxid bilden.

Eine Diskussion der möglichen Bildung von TiC-Keimen in der kohlenstoffreichen Mischung wird von Chigai, Yamamoto & Kozasa [1999] geliefert, eine mögliche Identifikation von TiC-Clustern durch Beobachtung wird in Helden et al. [2000] diskutiert.

4.5 Nicht-Gleichgewichts Kondensation

Die Betrachtungen zur Gleichgewichtskondensation in Abschnitt 4 zeigen, welche Staubarten für Sterne mit der speziellen Elementzusammensetzung von AGB-Sternen im Übergang zwischen M- und C-Sternen die stabilsten sind. Nun muss das Problem berücksichtigt werden, welche Staubarten unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen, wie sie in stellarer Ausströmung auftreten, gebildet werden. Gewöhnlich ist die dynamische Expansionszeitskala in solchen Ausströmungen kürzer als die Zeitskala, auf der sich chemisches Gleichgewicht einstellen kann. Die Chemie bleibt dann hinter der Veränderung der Gleichgewichtszusammensetzung zurück, zur der sich das chemische System zu entwickeln sucht. Ab einem gewissen Punkt ist die Dichte des Windes so gering, dass die Chemie in der Tat eingefroren ist. Die unter solchen Umständen erhaltenen Staubzusammensetzungen repräsentieren Übergangsstadien in der chemischen Entwicklung des Systems, deren Natur nur durch Lösen der Ratengleichungen des Staubwachstums in einer expandierenden Umgebung bestimmt werden kann. Es ist zu erwarten, dass die stabilsten Gleichgewichtskondensate in diesem Fall auch die vorherrschenden Staubarten sind. Die relativen Quantitäten der unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen gebildeten unterschiedlichen Staubarten können sich aber von den im Fall von Gleichgewichtskondensation gebildeten sehr unterscheiden, siehe dazu Kapitel 5. Im Folgenden werden für die speziellen Bedingungen, welche bei nahezu gleichen Häufigkeiten von Sauerstoff und Kohlenstoff auftreten, die Grundgleichungen des Staubwachstums und der Bildung der neuen Staubarten beim M-S-C-Übergang vorgestellt.

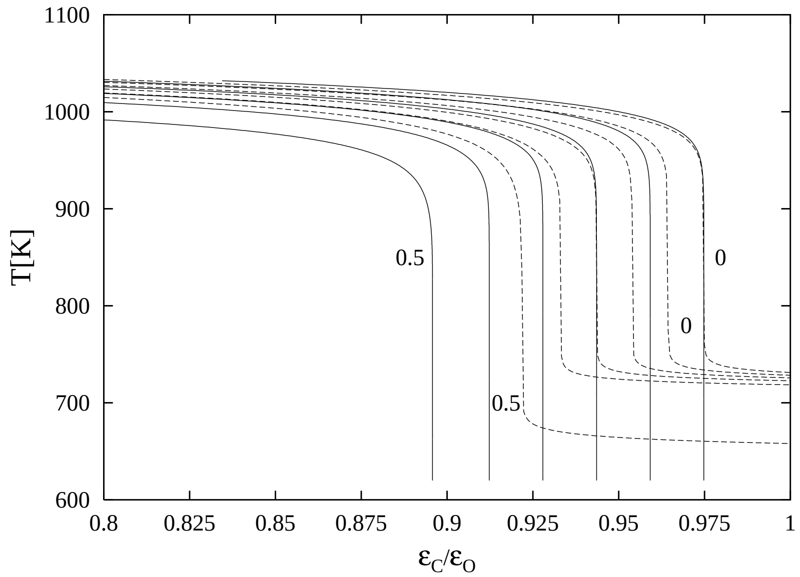

Abbildung 4.8 Pseudo-Gleichgewichtskondensation für Forsterit (durchgezogene Linie), und Enstatit (gestrichelte Linie) für $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} und für variierende C/O-Verhältnisse.

4.5.1 Wachstum von Silikatstaub

Die Silikate Forsterit und Enstatit können nicht durch Bildung eigener Kondensationskeime direkt aus der Gasphase kondensieren. Ihr Wachstum aus der Gasphase erfordert die Existenz einer Art von bereits vorher gebildeten Keimen. Diese könnten beispielsweise durch TiO_2-Teilchen auf der sauerstoffreichen Seite des M-S-C-Übergangs bereitgestellt werden, wie bereits im vorherigen Abschnitt diskutiert. Die genaue Natur der Kondensationskeime wird offen gelassen, da sie derzeit nicht bekannt ist. Es wird lediglich angenommen, dass solche Teilchen existieren. Für das Wachstum auf bereits gebildeten Kondensationskeimen existiert gewöhnlicherweise keine oder keine bedeutende Nukleationsbarriere und es wird angenommen, dass die Silikate zu wachsen beginnen, sobald die Temperatur in der Ausströmung unter die Stabilitätsgrenze des Kondensats fällt.

In einer sauerstoffreichen Elementmischung sind Olivin und Pyroxen die beiden häufigsten festen Kondensate. Die Abbildung (4.4) zeigt den Kondensationsgrad f dieser zwei Silikate ($x = 1$) im chemischen Gleichgewicht, wenn sie nahezu frei von Eisen sind. Bei steigender Kohlenstoffhäufigkeit ist die Kondensation von Enstatit bei C/O-Häufigkeitsverhältnissen, die für S-Sterne aufgrund des Mangels an verfügbarem Sauerstoff typisch sind, unterdrückt, da der Sauerstoff vollständig in CO und Forsterit gebunden ist, sobald die Kohlenstoffhäufigkeit auf $\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm O} - 2\epsilon_{\rm Mg}$ angestiegen ist. Die Unterdrückung der Enstatitbildung muss allerdings nicht in einem Nicht-Gleichgewicht gegeben sein. Bei einem Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnis, das 0.8 überschreitet, liegen die Stabilitätsgrenzen von Forsterit und Enstatit nahe beieinander, wie in Abb. (4.8) zu sehen ist. Sie zeigt für die zwei hypothetischen Fälle, dass es nur einem der Silikate, entweder Forsterit oder Enstatit, erlaubt ist zu kondensieren, die berechnete (Pseudo-)Gleichgewichtskondensation beider Silikate.

Da die Stabilitätsgrenzen beider Silikate in der Temperatur sehr nahe bei einander liegen, könnten in einer abkühlenden Ausströmung beide beinahe zur gleichen Zeit beginnen, auf Kondensationskeimen zu kondensieren. Solange das kondensierbare Material in der Gasphase durch das Wachstum der beiden Festkörper noch nicht größtenteils aufgebraucht ist, wachsen sie unabhängig voneinander aus der Gasphase. Verursacht durch den Strahlungsdruck, welcher nach der Kondensation häufiger und effizient absorbierender Staubarten einsetze, verdünnt die starke Beschleunigung des Windes dann rasch das Windmaterial und hindert das System daran, sich in den Gleichgewichtszustand zu entwickeln. Daher hat man in einer Nicht-Gleichgewichtsberechnung beide Silikate zu berücksichtigen selbst wenn eine Gleichgewichtsberechnung die Abwesenheit eines der beiden vorhersagt. Das gleiche gilt für die Quarzbildung. Daher hat man auch die Quarzbildung zu berücksichtigen.

Die Nicht-Gleichgewichtskondensation von Olivin und Pyroxen wird in Kapitel 5 betrachtet. Im vorliegenden Fall taucht das Problem auf, dass für C/O-Häufigkeitsverhältnisse, die für S-Sterne typisch sind, und Temperaturen von der Größenordnung 1000 K und darunter, der meiste Sauerstoff in CO und SiO gebunden ist (siehe Abb. (4.1) oben). Das Silikatwachstum ist dann dadurch begrenzt, dass in der Gasphase ungenügende Mengen an O vorhanden sind, um die vollständige Kondensation von Si in Forsterit oder Enstatit zu ermöglichen. Im sauerstoffreichen Fall wird die Wachstumsrate durch die Kollisionsrate mit SiO-Molekülen bestimmt (siehe Gail & Sedlmayr [1999]). Der zur Bildung der SiO_4-Tetraeder in den Silikaten benötigte zusätzliche Sauerstoff wird von H_2O-Molekülen bereitgestellt, die im sauerstoffreichen Fall in ausreichender Menge in der Gasphase vorhanden sind. Ebenso sind Mg und Fe in der Gasphase in ausreichender Menge vorhanden. Dies trifft auf S-Sterne nicht zu, bei denen die Anlagerung von Sauerstoff vielleicht der begrenzende Faktor wird. Bei allen Kohlenstoffhäufigkeiten $\epsilon_{\rm C} < \epsilon_{\rm C,crit}$ (siehe Abb. (4.1) oben) ist in der Gasphase, neben CO und SiO, H_2O die häufigste Spezies, die Sauerstoff enthält. Daher verlangt die Bildung der Einheitszelle von SiO_4 in dem Silikatgitter für jedes SiO-Molekül die Anlagerung von drei (Olivin) oder zwei (Pyroxen) zusätzlichen H_2O-Molekülen aus der Gasphase, die den benötigten Sauerstoff liefern. Daher wird als Arbeitshypothese verwendet, dass die Wachstumsrate von Olivin $J_{\rm ol}^{\rm gr}$ durch

$$J_{\rm ol}^{\rm gr} = \begin{cases} J_{\rm SiO} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} > 3J_{\rm SiO}\ , \\ \\ \frac{1}{3}J_{\rm H_2O} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} < 3J_{\rm SiO} \end{cases} \tag{4.30}$$

gegeben ist und die Wachstumsrate von Pyroxen durch

$$J_{\rm py}^{\rm gr} = \begin{cases} J_{\rm SiO} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} > 2J_{\rm SiO}\ , \\ \\ \frac{1}{2}J_{\rm H_2O} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} < 2J_{\rm SiO} \end{cases} \tag{4.31}$$

wobei

$$J_{\rm SiO} = \alpha_{\rm SiO} n_{\rm SiO} v_{\rm th,SiO} \tag{4.32}$$
$$J_{\rm H_2O} = \alpha_{\rm H_2O} n_{\rm H_2O} v_{\rm th,H_2O}\,. \tag{4.33}$$

Die α's sind die Wachstumskoeffizienten, für die $\alpha_{\rm SiO} = \alpha_{\rm H_2O}$ angenommen wird. Für $\alpha_{\rm SiO}$ werden für Olivin und Pyroxen die in Kapitel 5 diskutierten Werte verwendet. Mit dieser Annahme über die Wachstumsraten werden die Radiusänderungen der Silikatteilchen, die Bruchteile x von Magnesium in dem Gitter von Olivin und Pyroxen und der Verbrauch an kondensierenden Gasarten berechnet. Die Diffusion von Fe-Kationen in dem Olivin und Pyroxen Gitter wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Bezüglich des Wachstums der Quarzteilchen wird angenommen, dass die Wachstumsrate durch

$$J_{\rm qu}^{\rm gr} = \begin{cases} J_{\rm SiO} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} > J_{\rm SiO}\ , \\ \\ J_{\rm H_2O} & \text{wenn } J_{\rm H_2O} < J_{\rm SiO}\ . \end{cases} \tag{4.34}$$

gegeben ist. Für α wird wieder $\alpha_{\rm SiO} = \alpha_{\rm H_2O}$ angenommen und der in Kapitel 5 diskutierte Wachstumskoeffizient $\alpha_{\rm SiO}$ von Quarz verwendet.

Die Gleichungen für die Radiusänderung von Quarz ist durch

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0 \left(J_{\rm qu}^{\rm gr} - J_{\rm qu}^{\rm dec} \right) \tag{4.35}$$

gegeben, wobei V_0 das von einem nominalen Molekül im Festkörper belegte Volumen ist. Die Verdampfungsrate ist

$$J_{\rm qu}^{\rm dec} = \alpha_{\rm qu}\, v_{\rm SiO}\, \frac{p_{v,\rm SiO}}{kT}\ . \tag{4.36}$$

4.5.2 Wachstum der Olivin- und Pyroxenteilchen

Olivin mit der Zusammensetzung $\rm Mg_{2x}Fe_{2(1-x)}SiO_4$ wächst durch Anlagerung von SiO, Mg und Fe an der Ober äche des Teilchens und durch Oxidation durch Wasserdampf aus der Gasphase. Andere reaktive Spezies, die Si, Mg, Fe und O enthalten, kommen in vernachlässigbarer Häu gkeit in der Gasphase vor. Der Magnesiumgehalt x kann jeden im Prinzip Wert $0 \le x \le 1$ annehmen. Die thermisch stabilste Verbindung ist magnesiumreiches Olivin mit x nahe Eins. Die Nettoreaktionsgleichung für Olivinbildung ist:

$$\begin{aligned} 2x\mathrm{Mg}\ +\ 2(1-x)\mathrm{Fe}\ +\ \mathrm{SiO}\ +\ 3\mathrm{H_2O}& \\ \longrightarrow\ \mathrm{Mg}_{2x}\mathrm{Fe}_{2(1-x)}\mathrm{SiO_4(s)}\ +\ 3\mathrm{H_2}\,. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Die Rate des gesamten Wachstumsprozesses kann einerseits durch die Anlagerung eines SiO-Moleküls an der Oberfläche bestimmt sein, sofern ausreichend Mg und Fe vorhanden ist, um insgesamt zwei $\rm Mg^{2+}$ und $\rm Fe^{2+}$ Kationen pro Si-Atom zum Einbau in das Olivingitter beizusteuern. Oder die Rate wird durch die Anlagerung von Mg und Fe an ein wachsendes Teilchen festgelegt, sofern diese Bestandteile in der Gasphase selten sind. Die Anlagerungsraten an ein relativ zur Gasphase ruhendes Teilchen pro Zeiteinheit und Oberflächenelement sind:

$$J_{\rm SiO}^{\rm gr} = \alpha_{\rm SiO} n_{\rm SiO} v_{\rm th,SiO} \tag{4.38}$$
$$J_{\rm Mg}^{\rm gr} = \alpha_{\rm Mg} n_{\rm Mg} v_{\rm th,Mg} \tag{4.39}$$
$$J_{\rm Fe}^{\rm gr} = \alpha_{\rm Fe} n_{\rm Fe} v_{\rm th,Fe} \tag{4.40}$$
$$J_{\rm H_2O}^{\rm gr} = \alpha_{\rm H_2O} n_{\rm H_2O} v_{\rm th,H_2O}\ . \tag{4.41}$$

α bezeichnet den Stickingkoeffzienten, n ist die Teilchendichte der wachsenden Spezies in der Gasphase und v ist der thermischen Geschwindigkeit von Teilchen der Masse m

$$v = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} . \tag{4.42}$$

Ist die Rate des Silikatwachstums von der SiC-Ablagerung bestimmt, passen sich alle anderen Ablagerungsraten dieser Rate an, und die Wachstumsrate für sphärische Teilchen mit Radius a ist:

$$\left.\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathrm{growth}} = V_0 J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}} . \tag{4.43}$$

V_0 bezeichnet das Volumen des nominalen Monomers im Festkörper. Dies erfordert, dass für jedes SiO-Molekül zwei Mg- oder Fe-Atome (und drei H_2O-Moleküle) aus der Gasphase angelagert werden, d.h. es muss gelten:

$$J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Mg}} + J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Fe}} \geq 2 J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}} . \tag{4.44}$$

Ist die Anlagerungsrate von Mg und Fe kleiner als $2J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}}$, passt sich die Anlagerung von SiO und H_2O an das wachsende Teilchen der Anlagerungsrate von Mg und Fe an, und man erhält:

$$\frac{\left.\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathrm{growth}} = V_0 1}{2\left[J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Mg}} + J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Fe}}\right]} . \tag{4.45}$$

Die Verdampfungsrate von Olivin durch thermische Zersetzung ist gegeben durch (siehe Gail & Sedlmayr [1999]):

$$J^{\mathrm{dec}}_{\mathrm{ol}} = \alpha_{\mathrm{SiO}}\, v_{\mathrm{SiO}} \frac{p_{v,\mathrm{SiO}}}{kT} , \tag{4.46}$$

wobei $p_{v,\mathrm{SiO}}$ der Partialdruck der SiO-Moleküle im chemischen Gleichgewicht zwischen der Gasphase und Olivin ist, entsprechend Reaktion (4.37). Die Änderung des Teilchenradius durch diesen Prozess ist

$$\left.\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}\right|_{\mathrm{vapourisation}} = -V_0 J^{\mathrm{dec}}_{\mathrm{SiO}} . \tag{4.47}$$

Die gesamte Änderung des Teilchenradius ist durch die Summe von (4.43) und (4.47) gegeben oder durch die Summe von (4.45) und (4.47), je nach dem, ob die Gln. (4.44) erfüllt ist oder nicht. D.h. man erhält:

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0 \left(J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{ol}} - J^{\mathrm{dec}}_{\mathrm{ol}} \right) \tag{4.48}$$

wobei die Wachstumsrate von Olivin

$$J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{ol}} = \min \left(\frac{J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}} \ , \ 1}{2\left[J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Mg}} + J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Fe}}\right]} \right) . \tag{4.49}$$

ist.

Die Gleichung für den Magnesiumgehalt x in Olivin ist

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{3V_0}{a} \left[\frac{(x_g - x)\ J_{\mathrm{ol}}^{\mathrm{gr}} + 1}{2\left(J_+^{\mathrm{ex}} - J_-^{\mathrm{ex}}\right)} \right] . \tag{4.50}$$

Die Austauschrate von Fe durch Mg pro Ober flächenelement während Kollisionen von Mg mit der Teilchenoberfläche ist

$$J_+^{\mathrm{ex}} = n_{\mathrm{Mg}}\, v_{\mathrm{th,Mg}}\, \alpha^{\mathrm{ex}} . \tag{4.51}$$

α^{ex} beschreibt die Wahrscheinlichkeit für einen Austausch eines Fe-Gitteratoms an der Oberfläche durch ein Mg-Atom aus der Gasphase während des Streuprozesses. Die Rate der Umkehrreaktion ist

$$J_-^{\mathrm{ex}} = n_{\mathrm{Fe}}\, v_{\mathrm{th,Fe}}\, \beta^{\mathrm{ex}} . \tag{4.52}$$

Im chemischen Gleichgewicht gilt $J_+^{\mathrm{ex}} = J_-^{\mathrm{ex}}$ woraus folgt:

$$\beta^{\mathrm{ex}} = \alpha^{\mathrm{ex}} \frac{v_{\mathrm{th,Mg}}}{v_{\mathrm{th,Fe}}} \frac{n_{\mathrm{Mg,eq}}}{n_{\mathrm{Fe}}} . \tag{4.53}$$

Die e ektive Austauschrate ist dann

$$J_+^{\mathrm{ex}} - J_-^{\mathrm{ex}} = v_{\mathrm{th,Mg}}\, \alpha^{\mathrm{ex}} \left(n_{\mathrm{Mg}} - n_{\mathrm{Fe}} K_p(T,x) \right) . \tag{4.54}$$

K_p ist defniert durch

$$\frac{p_{\mathrm{Mg}}}{p_{\mathrm{Fe}}} = \mathrm{e}^{-\Delta G/RT} = K_p(T) \tag{4.55}$$

wie in Gail & Sedlmayr [1999].

Diese Gleichungen bilden das Modell für das Wachstum von Olivinteilchen aus der Gasphase. Wie oben diskutiert, wird angenommen, dass die Teilchen auf bereits gebildeten Keimen wachsen. Dann wird das gekoppelte Gleichungssystem von dem Punkt an, an dem für Olivin $J^{\mathrm{gr}}\ J^{\mathrm{vap}}$ übertrifft, für den Teilchenradius a der Olivinteilchen und ihrer Zusammensetzung x integriert.

Die Gleichungen, die das Wachstum von Pyroxenteilchen bestimmen, erhält man in vollständiger Analogie zu dem Fall der Olivinbildung.

Pyroxen mit der Zusammensetzung $\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{1-x}\mathrm{SiO}_3$ wächst durch Anlagerung von SiO, Mg und Fe an der Oberfläche und durch Oxidation durch Wasserdampf aus der Gasphase. Der Magnesiumgehalt x kann jeden Wert $0 \leq x \leq 1$ annehmen. Die thermisch stabilste Verbindung ist ein magnesiumreiches Pyroxen mit x nahe Eins, wie bei Olivin. Die chemische Nettoreaktionsgleichung der Pyroxenbildung ist

$$\begin{aligned} x\mathrm{Mg}\ +\ (1-x)\mathrm{Fe}\ +\ \mathrm{SiO}\ +\ 2\mathrm{H_2O} & \\ \longrightarrow\ \mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{(1-x)}\mathrm{SiO_3(s)}\ +\ 2\mathrm{H_2} . & \end{aligned} \tag{4.56}$$

Ist die Wachstumsrate von Pyroxen wie bei Olivin durch SiO-Anlagerung bestimmt, erhält man in vollständiger Analogie zum vorigen Fall

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0 \left(J_{\mathrm{py}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{py}}^{\mathrm{dec}} \right) , \tag{4.57}$$

wobei die Wachstumsrate von Pyroxen

$$J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{py}} = \min\left(J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}}\ ,\ \left[J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Mg}} + J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{Fe}}\right]\right)\ . \tag{4.58}$$

ist. Die Gleichung für den Magnesiumgehalt x in Pyroxen ist

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{3V_0}{a}\ \left[(x_g - x)\ J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{py}} + \left(J^{\mathrm{ex}}_{+} - J^{\mathrm{ex}}_{-}\right)\right]\ . \tag{4.59}$$

Die einzige Modi kation ist, dass nun kein Faktor $\frac{1}{2}$ bei dem Austauschterm auftaucht. Die Größen $J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiO}}$, $J^{\mathrm{dec}}_{\mathrm{py}}$, J^{ex}_{+}, und J^{ex}_{-} werden analog zu dem Fall von Olivin definiert.

Die Gleichungen bilden das Modell für das Wachstum von Pyroxenteilchen aus der Gasphase. Wie oben diskutiert, wird angenommen, dass die Teilchen auf bereits gebildeten Keimen wachsen. Dann wird das gekoppelte Gleichungssystem von dem Punkt an, an dem für Pyroxen J^{gr} J^{vap} übertrifft, für den Teilchenradius a der Pyroxenteilchen und ihrer Zusammensetzung x integriert.

4.5.3 Wachstum der Siliziumkarbidstaubteilchen

Wie anhand der 11.3 μm Emissionslinie von SiC zu sehen, sind Siliziumkarbid- (oder Karborund-) Staubteilchen in den meisten Kohlenstoffsternen vorhanden (siehe Wallerstein & Knapp [1998]). In sauerstoffreichen Objekten fehlen sie jedoch. Siliziumkarbid wird ebenfalls in einer geringen Zahl von S-Sternen beobachtet (Chen & Kwok [1993]). Dies scheint anbetracht der Abhängigkeit der Gleichgewichtshäufigkeit von SiC vom C/O-Verhältnis im Bereich von Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnissen $\epsilon_{\mathrm{C,crit}} \lessapprox \epsilon_{\mathrm{C}} \lessapprox \epsilon_{\mathrm{O}}$, in dem typische S-Sterne auftreten, natürlich zu sein. Die Abbildung (4.5) zeigt, dass im chemischen Gleichgewicht meistens 20% des Siliziums in SiC kondensiert, allerdings nur oberhalb der Stabilitätsgrenze von FeSi. Sobald letzteres stabil wird, wird SiC gegenüber Umwandlung in FeSi instabil. Dies schließt in einer Nichtgleichgewichtsumgebung die Bildung gewisser Mengen an Siliziumkarbid nicht aus, es ist jedoch unwahrscheinlich, dass sich in einer solchen Umgebung bedeutende Mengen SiC bilden werden.

Die Häufigkeit von SiC im chemischen Gleichgewicht steigt bei $\epsilon_{\mathrm{O}} \lessapprox \epsilon_{\mathrm{C}} \lessapprox 1.025\epsilon_{\mathrm{O}}$ mit fallendem C/O-Verhältnis stark an, während die Gleichgewichtshäufigkeit von FeSi auf Null sinkt. Obwohl Siliziumkarbid nur bei C/O-Häufigkeiten, bei denen der Stern als C-Stern eingestuft würde, das stabilste Si enthaltende Kondensat ist, ist es wahrscheinlich, dass sich bereits in einer Nichtgleichgewichtsumgebung nahe bei oder geringfügig über der Grenze $\epsilon_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{O}}$, an der der Stern immer noch als vom Spektraltyp S eingestuft werden kann, eine nicht verschwindende Menge Siliziumkarbid bildet. Aus diesem Grund geht in die Berechnung der Staubbildung im Nichtgleichgewicht die SiC-Kondensation mit ein.

Das Wachstum von Siliziumkarbid aus der Gasphase ist ein Prozess, der für die Halbleiterherstellung von technischem Interesse ist. Das wiederum hat viel Interesse auf sich gezogen. Eine aktuelle Diskussion dieses Aspekts mit vielen Literaturverweisen findet sich in Råback [1999]. Solche technischen Wachstumsprozesse laufen jedoch in zweierlei Hinsicht unter anderen Bedingungen ab als man sie in zirkumstellaren Staubhüllen antrifft: die in den Laboratorien verwendeten Temperaturen sind wesentlich höher als in der Kondensationszone zirkumstellarer Hüllen, und Siliziumkarbid wächst in technischen Prozessen üblicherweise in einer wasserarmen Umgebung. Dies stellt die direkte Anwendung von Daten über das SiC-Wachstum im Labor auf das Wachstum von SiC in zirkumstellaren Hüllen etwas in Frage. Da keine andere Information über SiC-Wachstum verfügbar ist, wird diese Information dennoch für eine vorläufige Berechnung des SiC-Wachstums in zirkumstellaren Hüllen verwendet.

Unter der Annahme eines Stickingkoeffizienten für die Dampfablagerung α von Eins wurde von Råback [1999] das Sublimationswachstum von SiC erfolgreich modelliert. Daher wird in der Modellrechnung $\alpha = 1$ gesetzt.

Die Abbildung (4.1) zeigt, dass in der zirkumstellaren Hülle im wesentlichen vier potenziell wichtige Gasarten vorhanden sind, die bei Temperaturen um $T = 1000$ K zum Wachstum von festem SiC beitragen: Si, Si_2C, SiC_2 und C_2H_2. Die häufigsten Moleküle, die Si und C enthalten, sind im Temperaturbereich zwischen 1200 und 1000 K, in dem das Wachstum von SiC in der zikumstellaren Hülle erwartet wird (siehe Abb. (4.1)), SiC_2 und Si_2C. SiC_2 dominiert bei höheren Temperaturen, während Si_2C bei niedrigeren Temperaturen dominiert. Da beide, Si_2C und SiC_2, auch unter den Bedingungen des SiC-Sublimatiosnwachstums sehr häufige Moleküle sind (siehe Råback [1999]), wird angenommen, dass das Wachstum von SiC durch Anlagerung eines Si- und eines C-Atoms während der Kollision mit Si_2C oder SiC_2 aus der Gasphase an der Oberfläche des wachsenden Kristalls geschieht

$$J^{\mathrm{gr}}_{\mathrm{SiC}} = \left(n_{\mathrm{Si_2C}}\, v_{\mathrm{Si_2C}} + n_{\mathrm{SiC_2}}\, v_{\mathrm{SiC_2}}\right)\, \alpha\,, \tag{4.60}$$

wobei $n_{\mathrm{SiC_2}}$, $n_{\mathrm{Si_2C}}$ und $v_{\mathrm{SiC_2}}$, $v_{\mathrm{Si_2C}}$ die Teilchendichten und die [rms.] thermischen Geschwindigkeiten der wachsenden Teilchen sind.

Die Dampfzusammensetzung während der SiC-Sublimation kann folgendermaßen erhalten werden: der Dampf sei aus Si, Si_2, Si_3, C, C_2, C_3, SiC, Si_2C, SiC_2, … zusammengesetzt, von denen allerdings nur Si und SiC_2 reichlich vorkommen (es ist anzumerken, dass sich die Dampfzusammensetzung von festem SiC von der Mischung aus Si enthaltenden Molekülen im Sternwind unterscheidet). Aus der stöchiometrischen Bedingung $p_{\mathrm{Si}} = p_{\mathrm{SiC_2}}$ und aus der Bedingung chemischen Gleichgewichts zwischen Festkörper und Gas

$$p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{C}}\, \mathrm{e}^{-\Delta G/RT} = 1 \tag{4.61}$$

(mit der freien Enthalpie ΔG der Bildung von festem SiC aus den einzelnen Atomen) und aus dem Massenwirkungsgesetz

$$p_{\mathrm{SiC_2}} = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{C}}^2\, K_p(\mathrm{SiC_2})\,, \tag{4.62}$$

wobei K_p die Massenwirkungkonstante von SiC_2 bezeichnet, ergibt sich in guter Näherung

$$p_{\mathrm{C}} = \left(K_p(\mathrm{SiC_2})\right)^{-\frac{1}{2}} \quad , \quad p_{\mathrm{Si}} = \mathrm{e}^{\Delta G/RT} p_{\mathrm{C}}^{-1}\,. \tag{4.63}$$

Die Partialdrucke der anderen Moleküle lassen sich daraus leicht berechnen. Die sich ergebende Dampfzusammensetzung des festen SiC wird in Abb. (4.9) dargestellt. Da

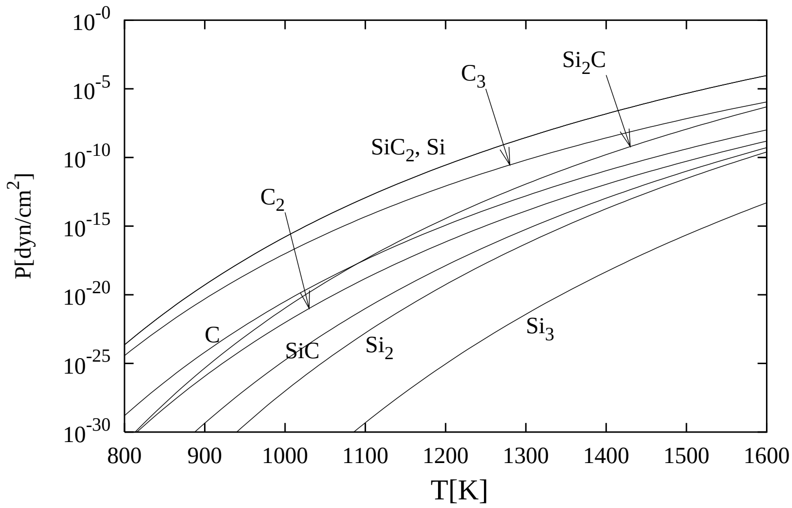

Abbildung 4.9 Molekulare Zusammensetzung des Dampfs von SiC im chemischen Gleichgewicht.

die dominierenden Teilchen im Dampf SiC_2 und Si sind, ist die Zersetzungsrate von festem SiC

$$J_{\rm SiC}^{\rm dec} = 2\alpha v_{\rm SiC_2} \frac{p_{v,{\rm SiC_2}}}{kT} \,, \tag{4.64}$$

wobei $p_{v,{\rm SiC_2}}$ der Gleichgewichtsdampfdruck der SiC_2-Moleküle ist. Der Faktor 2 trägt der Tatsache Rechnung, dass Abdampfung von einem SiC_2 in die Gasphase aus stöchiometrischen Grunden von der Abdampfung von einem Si in die Gasphase begleitet wird. Durch den Verlust eines SiC_2 aus festem SiC verliert der Festkörper nominal zwei SiC-Moleküle.

Die Radiusänderung der SiC-Teilchen (abgekürzt durch ‘sc’) wird dann berechnet aus

$$\frac{{\rm d}a_{\rm sc}}{{\rm d}t} = V_{0,{\rm sc}} \left(J_{\rm sc}^{\rm gr} - J_{\rm sc}^{\rm dec} \right) \,. \tag{4.65}$$

Dies ist zusammen mit den Raten (4.60) und (4.64) das Modell für das Wachstum von SiC-Teilchen. Gleichung (4.65) wird von dem Punkt an gelöst, an dem $J_{\rm sc}^{\rm gr} > J_{\rm sc}^{\rm dec}$.

Das Wachstum von SiC-Teilchen in C-Sternen wird von einem etwas anderem Standpunkt aus auch von Kozasa et al. [1996] diskutiert.

4.5.4 Wachstum von FeSi

FeSi ist in der Gegenwart von H_2O gegenüber der Umwandlung in festes Fe und Silizium-Sauerstoff-Verbindungen instabil. Daher bildet sich bei $\epsilon_{\rm C} < \epsilon_{\rm C,crit}$ kein FeSi, wie anhand Abb.(4.5) zu sehen ist. Seine Bildung ist nur auf der kohlenstoffreichen Seite des M–S–C–Übergangs möglich.

Unter der Annahme sphärischer Teilchen lautet die Wachstumsgleichung für den Teilchenradius der FeSi-Teilchen (abgekürzt durch ’fs’)

$$\frac{{\rm d}a_{\rm fs}}{{\rm d}t} = V_{0,{\rm fs}} \left(J_{\rm fs}^{\rm gr} - J_{\rm fs}^{\rm dec} \right) \,, \tag{4.66}$$

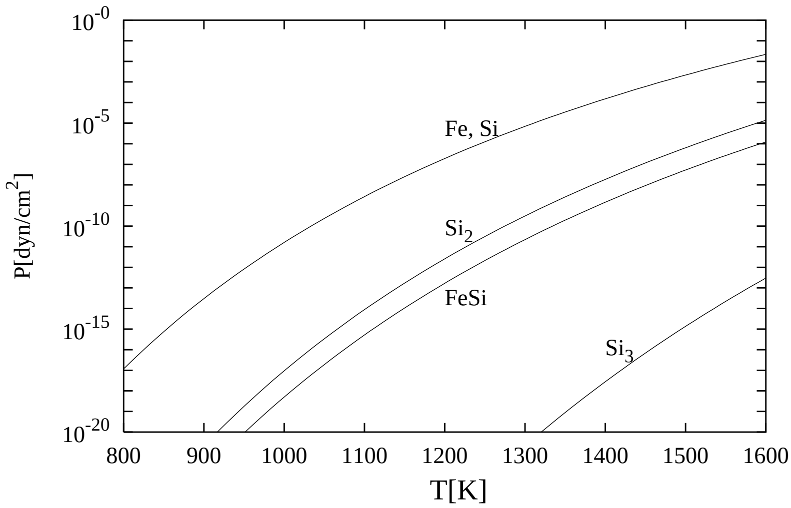

Abbildung 4.10 Molekulare Zusammensetzung des Dampfs von FeSi im chemischen Gleichgewicht.

wobei $V_{0,\mathrm{fs}}$ das von einem nominalen Molekül im Festkörper belegte Volumen ist und $J_{\mathrm{fs}}^{\mathrm{gr}}$ und $J_{\mathrm{fs}}^{\mathrm{dec}}$ die Raten sind, mit denen sich Si-Atome durch Wachstums- und Verdampfungsprozesse an der Oberfläche des Festkörpers entsprechend anlagern oder abdampfen.

Die Dampfzusammensetzung von FeSi berechnet sich wie folgt: Der Dampf aus der FeSi-Verdampfung besteht aus freien Fe- und Si-Atomen und aus den Molekülen FeSi, $\mathrm{Si_2}$ und $\mathrm{Si_3}$, von denen nur Fe und Si reichlich vorkommen. Die stöchiometrischen Bedingungen fordern dann $p_{\mathrm{Fe}} = p_{\mathrm{Si}}$. Chemisches Gleichgewicht zwischen Dampf und Festkörper erfordert

$$1 = p_{\mathrm{Fe}} p_{\mathrm{Si}}\, \mathrm{e}^{-\Delta G/RT}\,, \tag{4.67}$$

wobei ΔG die freie Enthalpie der Bildung von festem FeSi aus den freien Atomen ist. Aus diesen zwei Bedingungen erhält man die Näherung (mit sehr guter Genauigkeit)

$$p_{\mathrm{Fe}} = p_{\mathrm{Si}} = \mathrm{e}^{\Delta G/2RT}\,. \tag{4.68}$$

Daraus können die Dampfdrucke der unterschiedlichen Moleküle berechnet werden. Abbildung (4.10) zeigt die Dampfzusammensetzung von FeSi. Sie besteht nahezu ausschließlich aus freien Fe- und Si-Atomen, was die Annahme, welcher der Näherungslösung (4.68) zugrunde liegt, rechtfertigt. Die Zersetzungsrate von FeSi kann dann aus

$$J_{\mathrm{fs}}^{\mathrm{dec}} = \alpha_{\mathrm{FeSi}} v_{\mathrm{th,Si}} \frac{p_{v,\mathrm{Si}}}{kT} \tag{4.69}$$

berechnet werden. Der Dampfdruck $p_{v,\mathrm{Si}}$ ist durch (4.68) gegeben. Es gelang nicht, gemessene Werte für den Verdampfungskoeffizienten von FeSi in der Literatur zu finden. Da sich FeSi bei hohen Temperaturen wie ein Metall verhält, wird ein für Metalle typischer Wert von $\alpha_{\mathrm{FeSi}} = 1$ verwendet.

Bei Sauerstoff-Kohlenstoff-Häufigkeitsverhältnissen, die typisch für S-Sterne sind (siehe Abb. (4.1) oben), sind im stellaren Wind häufig vorkommende Sorten, die Fe und Si enthalten:

$$\mathrm{Fe},\ \mathrm{Si},\ \mathrm{SiO},\ \mathrm{SiS},\ \mathrm{Si_2C}\,.$$

Die Anlagerung von Fe- und Si-Atomen aus der Gasphase ist ein möglicher Wachstumsmechanismus von FeSi. In diesem Fall bestimmt der Zuwachs von Si-Atomen die Rate, da sie im Windmaterial weniger häufig als Fe-Atome sind (siehe Abb. (4.1)). Die Wachstumsrate ist dann

$$J_{\rm fs}^{\rm gr} = \alpha_{\rm FeSi} v_{\rm th,Si} n_{\rm Si}\,. \tag{4.70}$$

Für die drei alternativen Reaktionen

$$\begin{aligned} \mathrm{Fe} + \mathrm{SiO} &\rightarrow \mathrm{FeSi(s)} + \mathrm{O} \\ \mathrm{Fe} + \mathrm{SiS} &\rightarrow \mathrm{FeSi(s)} + \mathrm{S} \\ \mathrm{Fe} + \mathrm{Si_2C} &\rightarrow \mathrm{FeSi(s)} + \mathrm{SiC} \end{aligned}$$

ist die Änderung freier Enthalpie entsprechend +41, -131, -336 kJ Mol^{-1} (Daten aus Barin [1992]). Die Bildung von FeSi(s) aus Fe-Atomen und SiO ist nicht möglich, die Bildung aus Fe und SiC oder $\mathrm{Si_2C}$ könnte aber prinzipiell auftreten, wird in dieser Modellrechnung jedoch nicht berücksichtigt.

Gleichungen (4.66), (4.69) und (4.70) bestimmen die Modellannahmen für das Wachstum von FeSi-Teilchen in zirkumstellaren Hüllen von S-Sternen. Die Wachstumsgleichung (4.66) wird von dem Punkt an gelöst, an dem $J_{\rm fs}^{\rm gr} > J_{\rm fs}^{\rm dec}$.

4.5.5 Mögliche Nukleation von FeSi

Die Betrachtung von Abb. (4.1) ergibt, dass die Häufigkeit der FeSi-Moleküle in der Gasphase bei $T = 1000$ K gering ist, jedoch nicht extrem gering. Sie sind mit Sicherheit nicht für das FeSi-Wachstum wichtig, mögen aber für die direkte Nukleation von FeSi aus der Gasphase durch homogene Nukleation verantwortlich sein, wenn kein anderer passender Keim für FeSi-Teilchen verfügbar ist. Ist der kritische Cluster der FeSi-Teilchen das Monomer FeSi, erhält man für die Nukleationsrate (siehe Gail & Sedlmayr [1998a])

$$J_{\rm nucl} = n_{\rm FeSi}^2 v_{\rm th,FeSi} \sigma \alpha\,. \tag{4.71}$$

Um die Größenordnung der Nukleationsrate zu schätzen, verwendet man $v_{\rm th} = 3\,10^4\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$, $\sigma = 10^{-15}\,\mathrm{cm}^2$, $\alpha = 1$, $n_{\rm FeSi}/N_{\rm H} = 10^{-10}$ (siehe Abb. (4.1)) und erhält für die Zahl gebildeter Teilchen pro Wasserstoffkern und pro Sekunde

$$\frac{J_{\rm nucl}}{N_{\rm H}} \approx 3\,10^{-31} N_{\rm H}\,. \tag{4.72}$$

Für die Teilchenzahldichte von H-Kernen erhält man

$$N_{\rm H} = \frac{\dot M}{1.4 m_{\rm H}\, 4\pi\, r^2 v}\,. \tag{4.73}$$

Vorausgesetzt, dass der Wind von S-Sternen durch Staubkondensation angetrieben wird und nicht durch einen völlig anderen Mechanismus (wie Pulsation), treibt nur eine starke Kondensation von FeSi den Wind zu hohen Überschall Geschwindigkeiten, da FeSi das erste stark absorbierende Material sein wird, das im Wind von

S-Sternen kondensiert. Dann kann man annehmen, dass der Wind in die Staubbildungszone mit etwa Schallgeschwindigkeit eindringt, beispielsweise mit $v_{\rm gas} \approx 10^5\,{\rm cm\,s^{-1}}$. Für einen Stern mit $L = 10^4 L_\odot$ und $T_{\rm eff} = 3000$ K wird bei $r \approx 4.5 R_* \approx 1\,10^{14}$ cm eine Temperatur von $T \approx 1\,000$ K erreicht. Die Dichte der Wasserstoffkerne ist dann $n_{\rm H} \approx 3\,10^{10}\,{\rm cm^{-3}}$. Wird angenommen, die Ausdehnung der staubbildenden Schicht sei von der Ordnung $0.5R_*$ (das ergibt sich aus Modellrechnungen zum Staubwachstum), ist die Verweildauer des Windmaterials in der staubbildenden Schicht

$$\tau_{\rm gr} = \frac{\Delta r}{v_{\rm gas}} \approx 1\,10^8\,{\rm s}\,. \tag{4.74}$$

Die Zahl der im Wind durch direkte FeSi-Nukleation gebildeten FeSi-Teilchen folgt zu

$$\frac{n_{\rm gr}}{N_{\rm H}} = \frac{J_{\rm nucl}}{N_{\rm H}} \tau_{\rm gr} \approx 9\,10^{-13}\ \frac{\rm Keim}{\rm H\text{-}Kern}\,, \tag{4.75}$$

was von der richtigen Größenordnung ist, um effiziente Kondensation im Wind zu erlauben.

Diese Abschätzung bezieht sich auf die eher extreme Situation einer starken Unterkühlung, wenn die Größe des kritischen Clusters der Nukleation zum Monomer abgesunken ist, was unter realistischen Bedingungen unwahrscheinlich scheint. Es zeigt sich jedoch, dass sich FeSi zumindest prinzipiell direkt aus der Gasphase bilden könnte, ohne das Erfordernis bereits gebildeter Keime. In Stephens [1989] wird von der Beobachtung von Nukleation von FeSi in Kondensationsexperimenten unter Verwendung von Stoßrohren berichtet. Da in der stellaren Ausströmung wahrscheinlich Zentren heterogenen Wachstums von Keimen existieren, wird in diesen Modellrechnungen angenommen, FeSi wachse auf bereits gebildeten Keimen.

4.5.6 Wachstum von Eisenstaubteilchen

Abbildung (4.5) zeigt, dass für C/O-Häufigkeitsverhältnisse, die für S-Sterne relevant sind, festes Eisen ein mögliches Kondensat ist. Anders als für M- und S-Sterne ist dies jedoch nicht das einzige stabile Kondensat, das Fe enthält, ein Teil des Fe wird in FeSi kondensieren.

Aufgrund der geringen Bindungsenergie in kleinen Eisen Cluster ist die Nukleation der Eisenteilchen aus der Gasphase nicht möglich (Gail & Sedlmayr [1998a]). Eisen kann sich nur durch heterogenes Wachstum auf Keimen bilden, die sich oberhalb der Kondensationstemperatur von Fe bildeten. Die Bildung reiner Eisenteilchen hängt nicht von dem Kohlenstoff-Sauerstoff-Verhältnis in der stellaren Ausströmung ab, da die einzige reichlich vorkommende Gasphasenspezies, welche Fe enthält, das freie Fe-Atom ist, unabhängig vom C/O-Häufigkeitsverhältnis. Der einzige Unterschied zur Eisenkondensation in echten M- und C-Sternen ist, dass in S-Sternen die Fe-Bildung in Konkurrenz zur FeSi-Bildung verläuft.

4.5.7 Änderung der Häufigkeit der Gasphase

Für das Wachstum der Spezies SiO, Mg,Fe und H_2O kann man annehmen, dass Mg und Fe in der Gasphase nur als freie Atome vorhanden sind. Silizium ist in der

Gasphase als SiO vorhanden, nur ein kleine Teil ist in SiS. Sauerstoff ist nur in CO, SiO und H_2O vorhanden. Die Teilchendichte der H_2O-Moleküle in der Gasphase ist gegeben durch

$$n_{\mathrm{H_2O}} = \Big[\epsilon_{\mathrm{O}} - \epsilon_{\mathrm{C}} - (1 + 3f_{\mathrm{ol}} + 2f_{\mathrm{py}} + f_{\mathrm{qu}})\,\epsilon_{\mathrm{Si}} - f_{\mathrm{pe}}\epsilon_{\mathrm{Mg}}\Big] \cdot N_{\mathrm{H}}\,, \qquad (4.76)$$

die Teilchendichte der SiO-Moleküle ist

$$n_{\mathrm{SiO}} = (1 - f_{\mathrm{ol}} - f_{\mathrm{py}} - f_{\mathrm{qu}})\epsilon_{\mathrm{Si}}\,N_{\mathrm{H}}\,, \qquad (4.77)$$

die Teilchendichte der Fe-Atome ist

$$n_{\mathrm{Fe}} = \Big[\epsilon_{\mathrm{Fe}}(1 - f_{\mathrm{ir}}) - (2(1 - x_{\mathrm{ol}})f_{\mathrm{ol}} + (1 - x_{\mathrm{py}})f_{\mathrm{py}})\,\epsilon_{\mathrm{Si}}\Big] \cdot N_{\mathrm{H}}\,, \qquad (4.78)$$

und die der Mg-Atome ist

$$n_{\mathrm{Mg}} = \Big[\epsilon_{\mathrm{Mg}}(1 - f_{\mathrm{pe}}) - (2x_{\mathrm{ol}}f_{\mathrm{ol}} + x_{\mathrm{py}}f_{\mathrm{py}})\,\epsilon_{\mathrm{Si}}\Big]\,N_{\mathrm{H}}\,. \qquad (4.79)$$

Diese Teilchendichten werden fur die Berechnung der Wachstumraten benutzt.

4.5.8 Anfangsbedingungen

Das Lösen der Gleichungen für das Wachstum von Staubteilchen erfordert die Aufstellung von Anfangsbedingungen. Die Wahl lautet wie folgt:

Die Gleichungen für das Staubwachstum werden von dem Punkt an nach außen gelöst, ab dem bei fallender Temperatur das Kondensat stabil wird. Da angenommen wird, dass die Teilchen um bereits gebildete Keime wachsen, wird als Anfangswert für den Teilchenradius der Radius des Keims genommen. Dieser Radius wird für alle Staubarten als $1\,nm$ angenommen. Als Teilchenzahldichte der Keime pro H-Kern im Wind wird für alle Staubarten 10^{-13} angenommen, da durch Beobachtung festgestellt wurde, dass typische Teilchenzahldichten in der Ausströmung von M-Sternen von der Ordnung einiger 10^{-13} sind (Knapp [1985]).

Um die Gleichungen (4.50) und (4.59) für den Magnesiumgehalt x von Olivin bzw. Pyroxen zu lösen, werden wie in Gail & Sedlmayr [1999] als Anfangsbedingungen die Lösungen der entsprechenden stationären Gleichungen (4.50) und (4.59) für x_{ol} bzw. x_{py} gewählt.

4.5.9 Stickingkoeffizient

Die Stickingkoeffizienten α von Olivin, Eisen und MgO werden gewählt wie in Gail & Sedlmayr [1999] beschrieben. Für Pyroxen konnte kein experimenteller Wert gefunden werden; aus diesem Grund wird willkürlich der gleiche Stickingkoeffizient wie für Olivin verwendet, obwohl es zugegebenermaßen keinen speziellen Grund gibt, warum beide Koeffizienten gleich sein sollten.

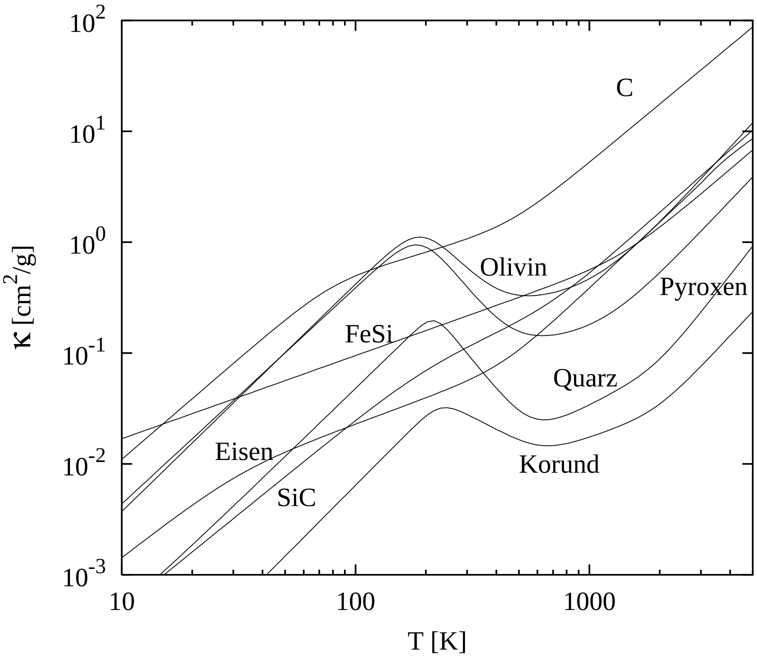

Abbildung 4.11 Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten, abhängig von der Temperatur, für verschiedene Staubkomponenten, gemittelt über die MRN-Verteilung.

4.5.10 Kohlenstoffkondensation

Im chemischen Gleichgewicht können kleine Mengen an Kohlenstoffstaub kondensieren, wenn das Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnis ≈ 1.025 übersteigt (siehe Abb. (4.6)). Solchen Sternen wird der Spektraltyp C zugeordnet und nicht der Spektraltyp S, entsprechend der molekularen Häufigkeiten in ihren stellaren Atmosphären (siehe Abb. (4.2)). Bei C/O-Häufigkeitsverhältnissen unter ≈ 1.025 existiert kein kondensierter Kohlenstoff im chemischen Gleichgewicht. In zirkumstellaren Staubhüllen tritt Kohlenstoffwachstum unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen auf (z.B. Cherchneff [1998]). Obwohl bei Temperaturen über 1400 K Kohlenstoff in kohlenstoffreichen Elementmischungen thermodynamisch stabil wird (siehe Abb. (4.6)), funktionieren die Grundprozesse des Kohlenstoffwachstums nicht bei Temperaturen über $\approx 1\,100$ K (z.B. Cherchneff [1998]). Kohlenstoffstaub bildet sich dann bei nicht sehr viel höheren Temperaturen als die anderen vorkommenden Staubarten. Da sich bei Kohlenstoff bis zu $C/O \lesssim 1.05$ nur geringe Mengen an Kohlenstoffstaub bilden können, sind sie im Vergleich zur Beschleunigung des Windes durch Strahlung durch die anderen Staubarten dynamisch unbedeutend. Aus dieser Grund wird in diesem Arbeit die Kohlenstoffstaubbildung nicht berücksichtigt.

4.6 Windmodell

Es wurden einfache Modelle der Staubkondensation in der Ausströmung von Sternen mit Kohlenstoff-Sauerstoff-Verhältnissen gerechnet, die zwischen $C/O<1$ und $C/O>1$ variieren, um die Änderungen der Zusammensetzung des zirkumstellaren Staubs während des M-S-C-Übergangs zu untersuchen.

Tabelle 4.3: Daten für die Wachstums- und Verdampfungskoeffizienten, die in der Rechnung verwendet wurden.

Staubsorte	A	ρ	α	Referenze
$(Mg,Fe)_2SiO_4$	172.23	3.75	0.1	Nagahara & Ozawa [1996]
$(Mg,Fe)SiO_3$	116.16	3.58	0.1	Schätzung
Fe	55.85	7.86	1.0	Landolt-Börnstein [1968]
FeSi	83.93	6.1	1.0	Schätzung
SiC	40.10	2.2	1.0	Råback [1999]

Das stationäre, kugelsymmetrische Windmodell, das diesen Berechnungen zugrunde lieget, ist in Kapitel 3 beschrieben.

Die chemische Zusammensetzung der Gasphase wird unter der Annahme chemischen Gleichgewichts der molekularen Sorten berechnet. Die Berechnung beschränkt sich auf die häufigsten Moleküle der Elemente H, C, N, O, Mg, Si, Fe, S, Al und Ca. Für die Problemstellung des Staubwachstums sind die Häufigkeiten von H_2O, SiO, Si, SiS, SiC_2, Si_2C, Fe und Mg von besonderer Bedeutung. Die Annahme chemischen Gleichgewichts scheint hinsichtlich der Häufigkeiten von Si, Si_2C und SiC_2 in dem Gebiet mit $\epsilon_C \approx \epsilon_{C,crit}$ kritisch zu sein, da in diesem Gebiet gerade diese Molekülarten mit kleiner Häufigkeit vorhanden sind (siehe Abb. (4.1)) und deren Häufigkeiten in einer realen stellaren Ausströmung von den Häufigkeiten im chemischen Gleichgewicht etwas verschieden sein mögen. Eine Nicht-Gleichgewichts-Berechnung solcher Arten wäre wünschenswert, doch scheinen die Reaktionsverläufe der Si_mC_n-Verbindungen nicht gut verstanden zu sein.

Die Gleichungen für das Staubwachstum von Olivin, Pyroxen, Quarz, Eisen, FeSi und SiC wurden in diesem Paragraphen beschrieben. Sie werden für jede einzelne Staubsorte von dem Punkt, an dem die Wachstumsrate erstmalig die Zersetzungs-/Verdampfungsrate der Staubsorten übertrifft, nach außen hin gelöst. Die für die Berechnung des Wachstums der unterschiedlichen Staubteilchen verwendeten Stickingkoeffizienten sind in Tab. 4.3 aufgelistet. Um die Gleichungen für das Wachstum von Olivin und Pyroxen integrieren zu können, muss der Koeffizient α_{ex} von Mg und Fe (definiert in Gail & Sedlmayr [1999]) festgelegt werden. Dies bestimmt zu einem großen Teil das Verhältnis Fe/(Mg+Fe) in den Silikaten. Unglücklicherweise ist diese Größe wenig verstanden (siehe Gail & Sedlmayr [1999]) und es wird in dieser Berechnung ein Wert von $\alpha_{ex} = 0.1\alpha$ verwendet, wobei α der Stickingkoeffizient für das Teilchenwachstum ist. Dieser niedrige Wert führt zu einem hohen Verhältnis Fe/(Mg+Fe) der Teilchen, praktisch gleich dem Verhältnis in der Gasphase (≈ 0.4, wenn ein Teil des Fe in Eisenteilchen gebunden ist). Ein Nebeneffekt eines niedrigen α_{ex} und dem daraus folgenden hohen Eisengehalt von Olivin und Pyroxen ist eine Senkung ihrer Kondensationstemperatur im Vergleich zu ihren eisenfreien Endgliedern Forsterit und Enstatit. Durch Beobachtung ist bekannt, dass der Silikatstaub

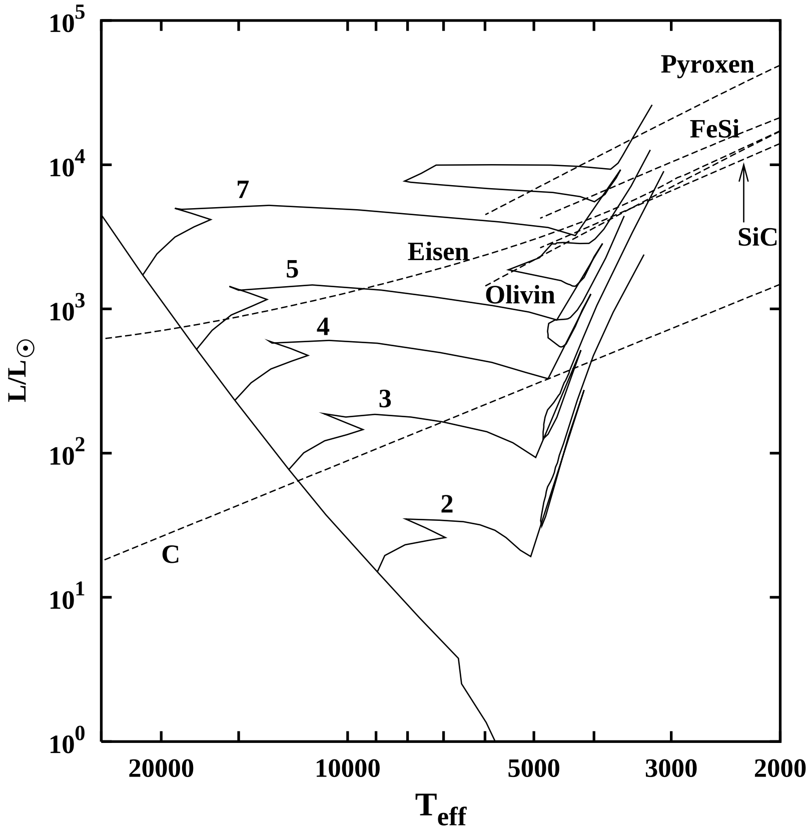

Abbildung 4.12 Leuchtkraft im Eddington-Limit L_{edd} für unterschiedliche Staubsorten.

in zirkumstellaren Hüllen nahezu eisenfrei ist (Molster [2000]), wenn seine Gitterstruktur kristallin ist. Das Problem der Bildung einer kristallinen Staubkomponente und ihres Eisengehalts geht über den Rahmen dieser Arbeit hinaus, es wird nur die Bildung amorphen Silikatstaubs in Betracht gezogen.

Die Abbildung (4.11) zeigt die Rosselandgemittelten Opazitäten der in der Modellrechnung verwendeten Staubkomponenten (siehe Kapitel 3), sowie einiger anderer in zirkumstellaren Staubhüllen interessanter Staubarten. Die Staubopazität der Silikate entsprechen jenen amorpher Staubteilchen. Die Abbildung (4.12) zeigt die Leuchtkraft im Eddington-Limit

$$L_{\mathrm{edd}} = \frac{4\pi c G M_*}{f\kappa} \qquad (4.80)$$

für unterschiedliche Staubsorten und einen repräsentativem Kondensationsgrad von $f = 0.5$. L_{edd} definiert die minimale Leuchtkraft, die nötig ist, damit der Strahlungsdruck auf Teilchen eine überschallschnelle Ausströmung antreibt. Es ist zu beachten, dass Silikate, Fe und FeSi einen Sternwind nahezu gleichermaßen effizient antreiben.

4.7 Ergebnisse für einzelne Staubmodelle

4.7.1 Staubkondensation bei S-Sternen

Aus Berechnungen im chemischen Gleichgewicht wird für Kohlenstoff/Sauerstoff-Verhältnisse, die kleiner als der kritische Wert von $\epsilon_{\rm C,crit}/\epsilon_{\rm O} = 0.975$ sind, erwartet, dass sich in der Staubhülle Silikate und festes Eisen als häufigste Staubteilchen bilden. Die Staubmischung entspricht dann im wesentlichen der normaler M-Sterne.

Die Abbildung (4.13) zeigt für einige ausgewählte C/O-Verhältnisse das Ergebnis von Berechnungen der Staubbildung im Nicht-Gleichgewicht für die radiale Änderung des Si-Anteils, der in den unterschiedlichen Silikatstaubteilchen kondensiert, und des Fe-Anteils, der in Eisenteilchen kondensiert. Die Windmodelle in dieser Abb. werden für eine Massenverlustrate von $\dot{M} = 10^{-5} M_{\odot}{\rm a}^{-1}$ berechnet. Offensichtlich sinkt die Häufigkeit der Silikatstaubteilchen mit steigender Kohlenstoffhäufigkeit, da der für die weitere Oxidation des SiO benötigte H_2O-Dampf rar wird. Gleichzeitig nimmt die Häufigkeit des im Wind gebildeten Eisenstaubs nach und nach zu, da die Häufigkeit der Wachstumspezies von Eisen, die freien Fe-Atome, nicht von der C/O-Häufigkeit abhängt. Mit steigender C/O-Häufigkeit verlangsamt die Abnahme des verfügbaren Sauerstoffs das Silikatwachstum bis zu dem Punkt, an dem für eine ausreichend hohe C/O-Häufigkeit der Strahlungsdruck auf die Eisenteilchen die Ausströmung zu weit überschallschnellen Geschwindigkeiten treibt. In diesem Fall verhindert die rapide Ausdünnung des Windmaterials zusätzlich das Wachstum von Silikatteilchen.

Die non-TE-Berechnung zeigt, dass sich ein gewisser Anteil an Quarz bildet. Dieser Anteil ist etwas größer als in Kapitel 5 gefunden wird, weil ein geringerer Wert für den Austauschkoeffizienten $\alpha_{\rm ex}$ angenommen wird. Dieser niedrige Wert erhöht indirekt den in einer non-TE-Berechnung gebildeten Quarzanteil, da ein hoher Eisengehalt von Olivin und Pyroxen deren Kondensationstemperatur senkt und sie näher an die Kondensationstemperatur von Quarz führt. Da sich dann der Quarz bereits zu bilden beginnt, bevor der Strahlungsdruck auf Olivin und Pyroxen den Wind beschleunigt und das ausströmende Gas stark verdünnt, haben die Quarz Kristallteilchen die Möglichkeit, mehr von dem verfügbaren SiO aufzusammeln als in dem Fall, dass Quarzkondensation erst einsetzt, nachdem bereits bedeutende Olivin- und Pyroxenbildung stattgefunden hat und das Gas schon stark beschleunigt wurde.

4.7.2 Staubkondensation bei SC-Sternen und kohlenstoffarmen Sternen

Die Berechnungen der Kondensation im chemischen Gleichgewicht deuten auf eine drastische Änderung der chemischen Zusammensetzung des in der stellaren Ausströmung gebildeten Staubs hin, sofern die Kohlenstoffhäufigkeit den durch (4.19) definierten kritischen Wert $\epsilon_{\rm C,crit}$ überschreitet. Entsprechend ihrer auftretenden Spektren würden die Sterne für $\epsilon_{\rm C,crit} < \epsilon_{\rm C} < \epsilon_{\rm O}$ als extreme S-Sterne, für $\epsilon_{\rm O} < \epsilon_{\rm C} < 1.1\epsilon_{\rm O}$ als SC-Sterne und für $\epsilon_{\rm C} \gtrsim 1.1\epsilon_{\rm O}$ als C-Sterne (Jaschek & Jaschek [1987]) klassifiziert. In dem Übergangsgebiet $\epsilon_{\rm C,crit} < \epsilon_{\rm C} < \epsilon_{\rm O}$ wird die Chemie durch die Nichtverfügbarkeit von Sauerstoff und Kohlenstoff zur Festkörperbildung charakterisiert. Unter diesen Umständen sind festes Eisen und FeSi die stabilsten Kondensate.

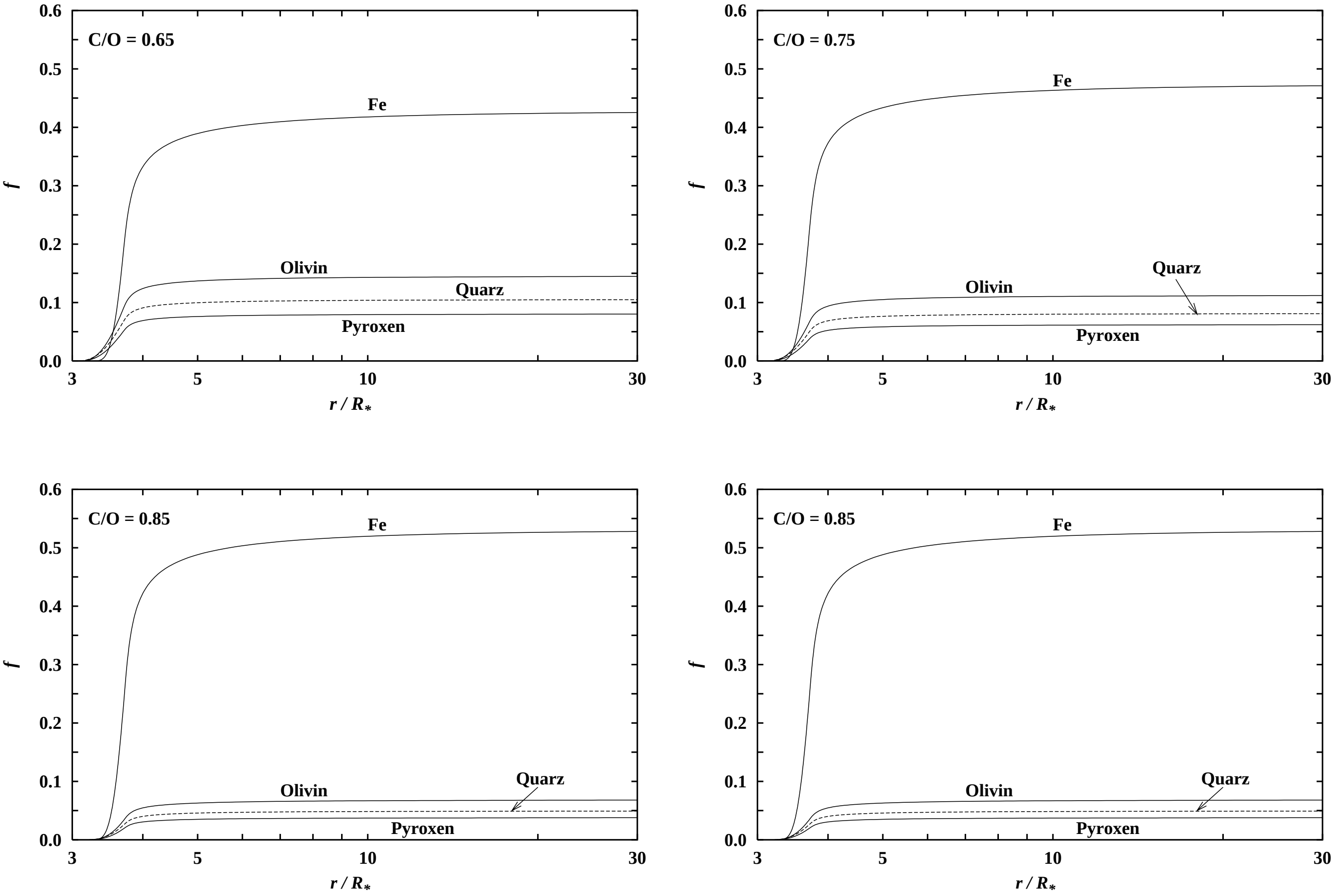

Abbildung 4.13 Kondensationsgrad f für die verschiedenen Staubsorten in M- und S-Sternen. Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

Bei etwas höheren Kohlenstoffhäufigkeiten (C/O>1) werden die Bedingungen für die SiC-Kondensation günstiger.

Die Abbildung (4.14) zeigt die Ergebnisse von Modellrechnungen der Staubbildung im Nicht-Gleichgewicht für die radiale Änderung des Kondensationsgrades der Staubteilchen Fe, FeSi und SiC. Die Windmodelle werden unter der Annahme einer Massenverlustrate $\dot{M} = 10^{-5} M_\odot \mathrm{a}^{-1}$ und vier verschiedener C/O-Verhältnisse berechnet. Die Abbildung oben links bezieht sich auf eine Häufigkeit $\epsilon_\mathrm{C} = 0.98\epsilon_\mathrm{O}$, welche sehr nahe an der kritischen Häufigkeit $\epsilon_\mathrm{C,crit} = 0.975\epsilon_\mathrm{O}$ liegt. Die dominante Staubart ist in diesem Fall Eisenstaub, es bildet sich auch etwas FeSi. Dies ändert sich rapide, wenn das C/O-Verhältnis den kritischen Wert $\epsilon_\mathrm{C,crit}/\epsilon_\mathrm{O} = 0.975$ auch nur geringfügig übersteigt. Die dominante Staubart ist dann FeSi. Wie von Berechnungen im chemischen Gleichgewicht erwartet, taucht Siliziumkarbid erstmals in nicht zu vernachlässigender Menge auf, sobald die Kohlenstoffhäufigkeit die des Sauerstoffs übertrifft. Mit weiterem Anstieg der Kohlenstoffhäufigkeit sinkt der Anteil des FeSi-Staubs und der Anteil des metallischen Eisens steigt. FeSi verschwindet bei $\epsilon_\mathrm{C}/\epsilon_\mathrm{O} = 1.025$ jedoch nicht als wichtiges Staubteilchen, wie die Ergebnisse der Kondensation im Gleichgewicht vermuten lassen, sondern wird selbst bei höheren C/O-Häufigkeitsverhältnissen in bedeutenden Mengen gebildet. Das gründet auf der Tatsache, dass durch die rapide Verdünnung des Windmaterials in der Ausströmung die chemische Zusammensetzung nicht in den chemischen Gleichgewichtszustand übergehen kann. Die mineralische Mischung in der Ausströmung repräsentiert einen eingefrorenen Zustand.

Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass sich FeSi nicht nur in S-Sternen, sondern auch in Kohlenstoffsternen bilden mag.

4.7.3 Abhängigkeit der Staubkondensation von der Massenverlustrate

Als Beispiel zeigt die Abb. (4.15) für die kohlenstoffreichen Modelle der Elementmischung die Änderung der Staubzusammensetzung im Wind bei sich ändernder Massenverlustrate. Offensichtlich hängen die im Wind gebildeten relativen Mengen an metallischem Eisen und FeSi-Teilchen stark von der Massenverlustrate ab. Dies folgt aus der Tatsache, dass (i) der ratenbestimmende Schritt des FeSi-Wachstums die Anlagerung von atomarem Si ist, und dass (ii) bei Temperaturen, bei denen das Wachstum von Fe- und FeSi-Teilchen möglich ist, freie Si-Atome nur in geringer Zahl auftreten (siehe Abb. (4.1)).

So wird bei niedrigen Massenverlustraten das Wachstum von Eisen bevorzugt, da das Wachstum von FeSi langsamer ist als das von metallischem Fe, obwohl FeSi bei einer bedeutend höheren Temperatur zu kondensieren beginnt, und da bei niedrigen Massenverlustraten der Kondensationsgrad von FeSi nicht das Ausmaß erreicht, das für eine starke Windbeschleunigung notwendig ist, bevor Eisenkondensation möglich wird. Von da an werden durch das zügige Eisenwachstum schnell genügende Mengen an kondensiertem Eisenmaterial gebildet, sodass der Wind durch den Strahlungsdruck auf die Eisenteilchen auf weit Überschallschnelle Geschwindigkeiten beschleunigt wird. Umgekehrt verhindert dies ein weiteres Wachstum von FeSi, was in dem Modell mit hoher Massenverlustrate der Grund für die geringe FeSi-Häufigkeit in

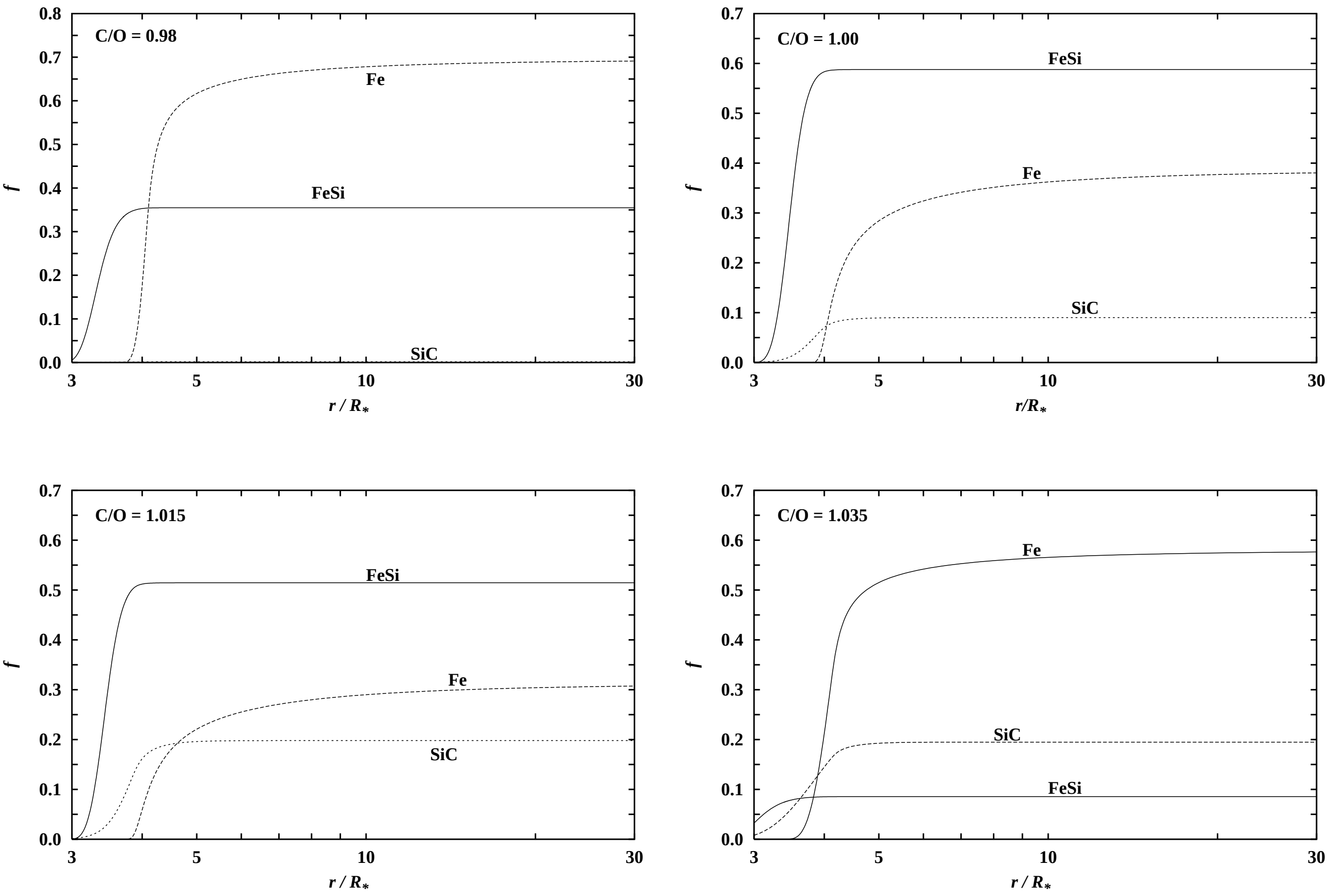

Abbildung 4.14 Kondensationsgrad f für die verschiedenen Staubsorten in S-Sternen. Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

Abb. (4.15) ist. Bei niedrigen Massenverlustraten werden somit als ein Ergebnis von Nicht-Gleichgewichts-Kondensation in der stellaren Ausströmung die Bildung großer Mengen an Eisenstaub erwartet, jedoch nur kleiner Mengen an FeSi. Diese sollten allerdings im Häufigkeitsbereich $\epsilon_{\mathrm{C,crit}} \lessapprox \epsilon_{\mathrm{C}} \lessapprox 1.025\epsilon_{\mathrm{O}}$ die dominante Staubart sein. FeSi kann sich nur in Objekten mit sehr hoher Massenverlustrate in großer Menge bilden.

4.7.4 Änderung der Staubzusammensetzung beim M-S-C-Übergang

Für einen Satz von Modellen mit C/O-Verhältnissen von C/O=0.65 bis C/O=1.10 wird die Änderung der Staubzusammensetzung in der zirkumstellaren Staubhülle berechnet. Dies deckt den Häufigkeitsbereich, beginnend mit Sternen, die nach ihrem Spektrum als reine M-Sterne erscheinen, bis zu Sternen, die als reine Kohlenstoffsterne erscheinen, ab. Die Zusammensetzung der Staubmischung ändert sich innerhalb eines engen C/O-Häufigkeitsintervalls um $\epsilon_{\mathrm{C,crit}}/\epsilon_{\mathrm{O}} = 0.9751$ vollständig.

Die Abbildung (4.16) zeigt die Ergebnisse für die sauerstoffreichen Häufigkeitsverhältnisse. Es sind die Kondensationsgrade von Si in den Si tragenden Kondensa-

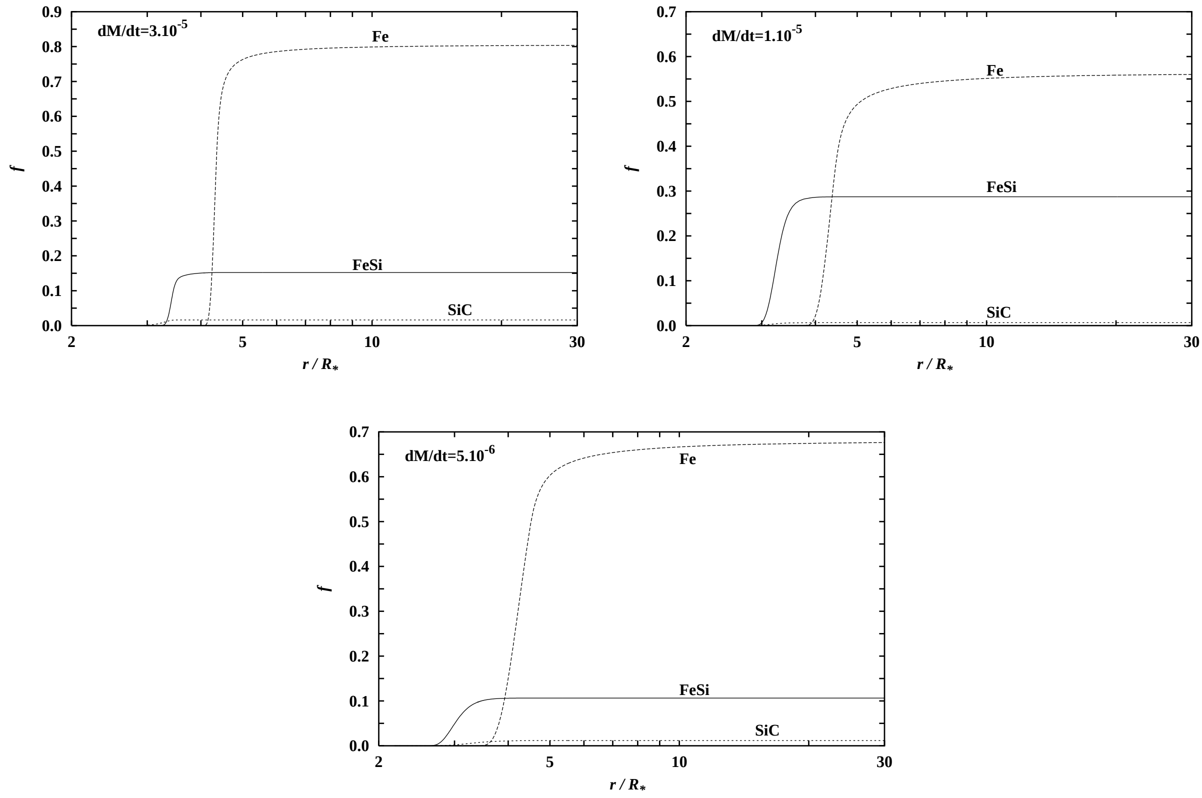

Abbildung 4.15 Windmodelle für verschieden Massenverlustrate und $\epsilon_{\rm C}/\epsilon_{\rm O} = 1.00$.

ten Olivin, Pyroxen und Quarz, sowie die von Fe in festes Eisen aufgetragen. Es ist zu beachten, dass zusätzlich ein Teil des Eisens in Olivin und Pyroxen kondensiert ist. Wie leicht zu sehen ist, nimmt die Häufigkeit der Silikatstaubarten Olivin und Pyroxen mit wachsender C/O-Häufigkeit ab. Der Hauptgrund hierfür ist die Abnahme der Häufigkeit von H_2O in der Gasphase, welches für die Oxidation von SiO aus der Gasphase zum SiO_4 Tetraeder der Silikate notwendig ist. Dies begrenzt die Wachstumsgeschwindigkeit von Olivin und Pyroxen, sobald das Häufigkeitsverhältnis von C/O, $\epsilon_{\rm C,crit}/\epsilon_{\rm O}$ erreicht, und unterdrückt bei $\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm C,crit}$ deren Bildung. Das Quarzwachstum wird ebenso durch den Mangel an verfügbarem Sauerstoff begrenzt. Zuerst fällt seine Häufigkeit zwischen den beiden Grenzfällen, gegeben durch (4.21) und (4.22) bedeutend, da der Sauerstoff rar wird und hauptsächlich bei der Forsterit- und Enstatitbildung verbraucht wird. Nach der Modellrechnung würde nahe des kritischen Häufigkeitsverhältnisses Quarz die dominante Si tragende Staubart sein.

Die Abbildung (4.17) zeigt die Ergebnisse für kohlenstoffreiche C/O-Häufigkeitsverhältnisse. Es ist der Kondensationsgrad von Fe in FeSi aufgetragen, sowie von Si in SiC. Der Kondensationsgrad von Fe in Eisenteilchen wird bereits in Abb. (4.16) gezeigt. Zu beachten ist die stark gedehnte Abszisse in Abb. (4.17). Der Anteil von Fe, das in festes Eisen kondensiert ist, sinkt bei Kohlenstoffhäufigkeiten von $\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm C,crit}$ schnell zugunsten der Bildung von festem FeSi. Das FeSi tritt bei $\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm C,crit}$ auf, da (i) mit wachsendem C/O-Verhältnis nur ein immer kleinerer Teil des Si in das sehr stark gebundene SiO-Molekül eingebaut werden kann, und (ii) das zweitstabilste Si-Molekül, das SiS, nicht all das Silizium binden kann, weil Schwefel nur etwa halb so häufig vorkommt wie Silizium. Der Überschuss an Si steht dann der Bildung von FeSi zur Verfügung, welches stabiler als reines Eisen ist (siehe Abb. (4.5)).

Bei $\epsilon_{\mathrm{C}} > \epsilon_{\mathrm{O}}$ wird die Bildung bedeutender Mengen an SiC möglich. Wie Abb. (4.17) zeigt, steigt der Kondensationsgrad von Si in SiC schnell an, sobald das C/O-Häufigkeitsverhältnis Eins übertrifft. Gleichzeitig sinkt wieder der Anteil an FeSi, da SiC vor FeSi kondensiert und das zur Bildung von FeSi benötigte Silizium aufbraucht.

Die Modelle werden bis zu einer Kohlenstoffhäufigkeit von $\epsilon_{\mathrm{C}} = 1.1\epsilon_{\mathrm{O}}$ gerechnet. Diese ist möglicherweise höher als das C/O-Häufigkeitverhältnis, bei dem Sterne mit der besonderen Staubmischung von S-Sternen existieren, da sich bei einem C/O-Häufigkeitsverhältnis, das etwas größer als Eins ist, Kohlenstoffstaub bilden kann, welcher in der vorliegenden Modellrechnung nicht berücksichtigt ist.

4.7.5 Infrarotspektren

Es wurden für Windmodelle mit $\dot{M} = 10^{-5} M_{\odot}/a$ ein Satz synthetischer Spektren für die Häufigkeitsverhältnisse von Kohlenstoff zu Sauerstoff zwischen $\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}} = 0.75$ und $\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}} = 1.10$, berechnet, um die Auswirkungen von Änderungen in der Staubzusammensetzung auf das Infrarotspektrum zu untersuchen, das von der Staubhülle im M-S-C-Übergang emittiert wird. Die Sauerstoffhäufigkeit wird festgehalten und die Kohlenstoffhäufigkeit schrittweise um $\Delta\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}} = 0.01$ erhöht.

Die Details der Strahlungstransportrechnung sind in Kapitel 5 beschrieben. Die in der Rechnung verwendeten optischen Konstanten sind für sauerstoffreiche Modelle ($\epsilon_{\mathrm{C}} < \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$) die selben, die in Kapitel 5 benutzt werden, für kohlenstoffreiche Modelle ($\epsilon_{\mathrm{C}} > \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$) sind die optischen Konstanten von FeSi und SiC in Anhang A beschrieben.

Die Abbildung (4.17) zeigt das synthetische Infrarotspektrum. Die Abbildung (4.17)a bezieht sich auf die sauerstoffreiche Mischung ($\epsilon_{\mathrm{C}} < \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$), in welcher der Staub in der zirkumstellaren Hülle aus Olivin, Pyroxen, Quarz und Eisen besteht. Die Abhängigkeit der Zusammensetzung dieser Mischung vom Verhältnis Sauerstoff zu Kohlenstoff kann aus Abb. (4.16) ersehen werden. Man kann leicht die zwei für amorphes Olivin und Pyroxen charakteristischen Silikatbanden um ca. 9.7μm und 18μm und zwei schwächere von glasigem Quarz erkennen. Die eher häufige Eisenstaubkomponente zeigt keine spektralen Merkmale, sie wirkt als nahezu graue Hintergrundabsorption. Die Silikatbanden sind bis zu einem C/O-Verhältnis von 0.9 sehr deutlich, um dann rapide zu verschwinden, was aus dem Kondensationsgrad, gezeigt in Abb. (4.16), folgt.

Der gegenwärtigen Modellrechnung zufolge können sich gewisse Mengen Quarz bilden, welche für die zwei deutlich sichtbaren Festkörperbanden um etwa 8.7 und 20.6 μm verantwortlich sind. Diese Banden erscheinen nahe des kritischen Häufigkeitsverhältnisses $\epsilon_{\mathrm{C}} > \epsilon_{\mathrm{O}} = 0.975$ ziemlich deutlich, besonders die Bande um 20.6 μm. Das ergibt sich aus der ziemlich starken Quarzbande und der Tatsache, dass Quarz mit steigendem C/O-Verhältnis als letzte Si haltige Komponente verschwindet. Nahe $\epsilon_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{C,crit}}$ sind die Quarzbanden nicht länger mit den starken Silikatbanden vermischt.

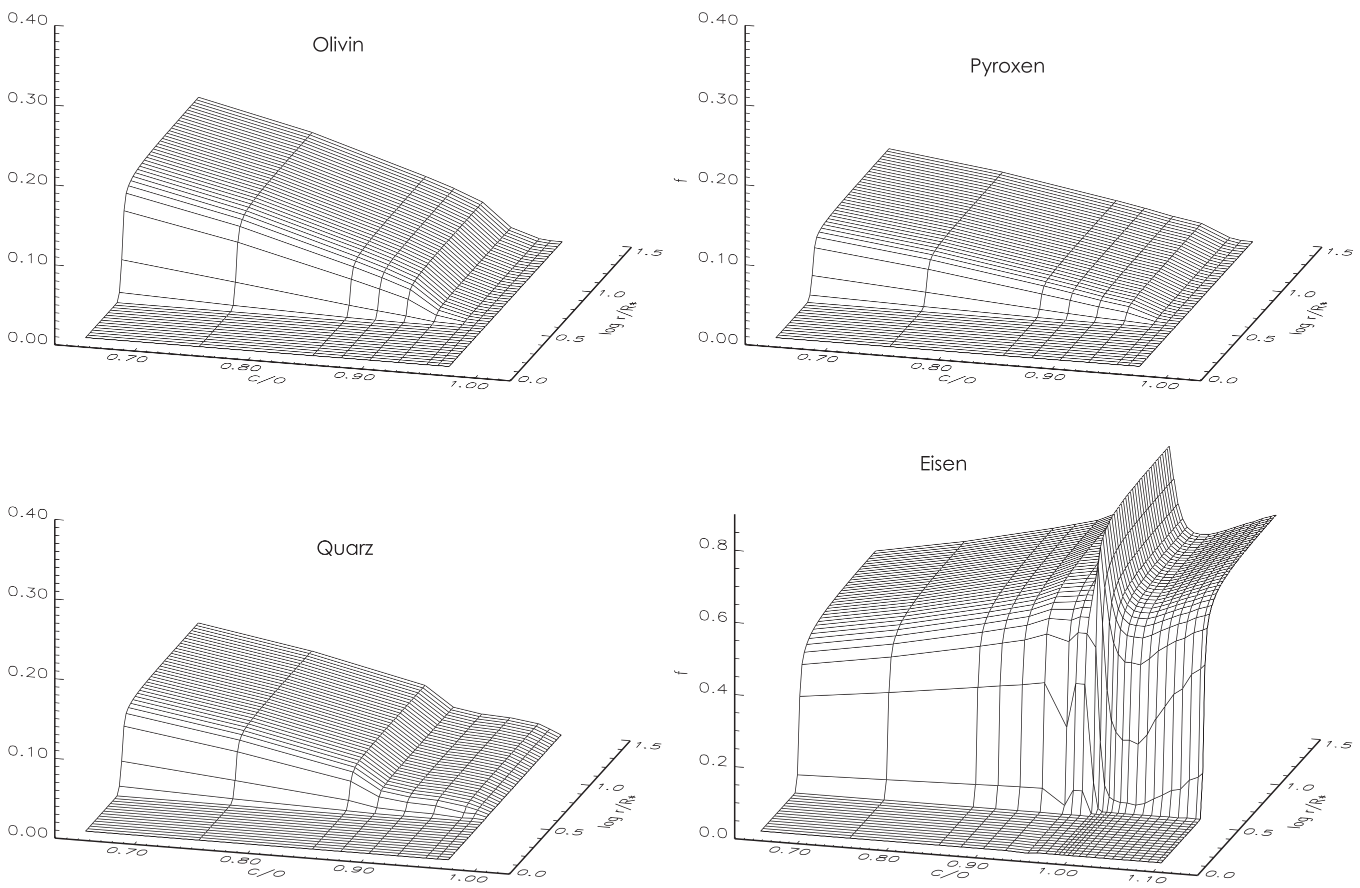

Abbildung 4.16 Kondensationsgrad f in Abhängigkeit von C/O-Verhältnis und Radius für Staubsorten auf der sauerstoffreichen Seite des M–S–C–Übergangs. Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

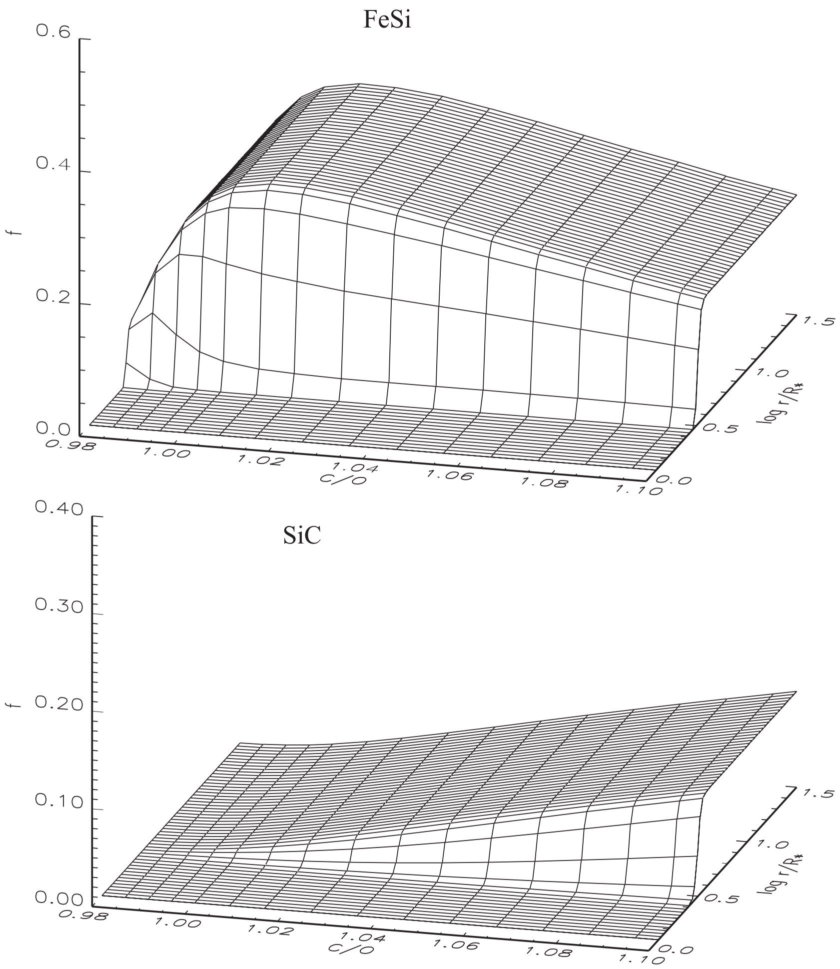

Abbildung 4.17 Kondensationsgrad f in Abhängigkeit von C/O-Verhältnis und Radius für Eisen (FeSi) und Silizium (SiC) auf der kohlenstoffreichen Seite des M–S–C–Übergangs. Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

Die Abbildung (4.18)b bezieht sich auf die kohlenstoffreiche Mischung ($\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm C,crit}$), in welcher der Staub aus festem Eisen, FeSi und SiC besteht. Die Abhängigkeit der Zusammensetzung dieser Mischung vom Verhältnis Sauerstoff zu Kohlenstoff ist in Abb. (4.17) dargestellt. Hier hat nur SiC ein ausgeprägtes Absorptionsband um etwa 11.3 μm. Das FeSi hat im Prinzip auch einige charakteristische Absorptionsbanden im fernen Infrarot des Spektrums (Ferrarotti et al. [2000]), welche allerdings nur bei sehr niedrigen Temperaturen $T \leq 200$K existieren, wenn FeSi sich optisch nahezu wie ein Isolator verhält. In der zirkumstellaren Hülle ist der Staub viel wärmer und FeSi verhält sich optisch wie ein Metall. Das Absorptionsband von SiC taucht im Spektrum nur für $\epsilon_{\rm C} > \epsilon_{\rm O}$ auf. Im engen Bereich der C-Häufigkeit $\epsilon_{\rm C,crit} < \epsilon_{\rm C} \leq \epsilon_{\rm O}$, in dem der Stern spektroskopisch als SC-Stern erscheint, wird in der Ausströmungen fast kein SiC gebildet.

In der Übergangsregion zwischen $\epsilon_{\rm C} \approx 0.9\epsilon_{\rm O}$ und $\epsilon_{\rm C} \approx 1.02\epsilon_{\rm O}$ erscheint das Spektrum als praktisch strukturloses Kontinuum. Dieses Absorptionsverhalten wird häufig als Folge der strukturlosen Absorption durch Kohlenstoffstaub angesehen, doch zeigen die Modellrechnungen, dass dies stattdessen eine Folge der strukturlosen Eisen- und FeSi-Absorption ist. Die wahren S-Sterne, die weder Silikat- noch Kohlenstoff Staub bilden können, sind nichtsdestoweniger effiziente Staubproduzenten. Sie bilden nahezu reinen Eisenstaub oder eine Mischung aus Eisen und FeSi. Die empirische Erkenntnis von Jura [1988], dass „Staub um S-Sterne dem um kohlenstoffreiche AGB-Sternen mehr ähnelt als dem Staub um sauerstoffreichen Sterne“, hat eine einfache Erklärung: es ist die Ähnlichkeit der infraroten Absorptionseigenschaften von C, Fe und FeSi (aus der Tatsache heraus, dass alle drei elektrische Leiter sind), die kohlenstoffähnliche Absorptionseigenschaften von Staub um die S-Sterne nachahmt.

4.7.6 Empirische Massenverlustraten und Staub-Gas-Verhältnisse

Mittels eines Verfahrens, das von Jura [1988] vorgeschlagen wurde, hat man wiederholt die Staubverlustraten von S-Sternen und das Massenverhältnis von Staub zu Gas bestimmt (z.B. Groenewegen & de Jong [1998] und zugehörige Referenzen). Es setzt den beobachteten Fluss bei 60μm mit der Massenverlustrate in Beziehung. Die Ergebnisse hängen vom verwendeten Massenabsorptionskoeffizienten bei $\lambda = 60\mu$m ab, für den, folgt man Jura [1988], im Allgemeinen ein Wert von $\kappa(60\mu\text{m}) = 150\,\text{g}\,\text{cm}^{-2}$ angenommen wird, entsprechend dem Massenabsorptionskoeffizienten von Graphit. Die Resultate aus der Modellrechnung zeigen aber, dass die Staubmischung um S-Sterne von Eisen dominiert wird und eine kohlenstoffreiche Mischung von einer Mischung aus Fe und FeSi. Es ergeben sich für diese Staubsorten bei $\lambda = 60\mu$m Massenabsorptionskoeffizienten von:

$$\text{Fe: } 12.2\,\text{cm}^2\,\text{g}^{-1},\ \text{FeSi: } 21.5\,\text{cm}^2\,\text{g}^{-1},\ \text{C: } 145\,\text{cm}^2\,\text{g}^{-1} \tag{4.81}$$

Eisen und FeSi haben geringere Absorptionskoeffizienten als Kohlenstoff, siehe dazu auch Abb. (4.11). Das bedeutet, dass die auf diese Weise bestimmten Staubverlustraten um einen Faktor von etwa 7 bis 12 erhöht werden müssen, da die wahre Staub Emission geringer ist als angenommen. Der genaue Korrekturwert hängt von dem Häufigkeitsverhältnis C zu O ab und kann nur durch Modellierung der Staubhüllen bestimmt werden. Auf jeden Fall ergibt die Korrektur der mit dieser Methode für

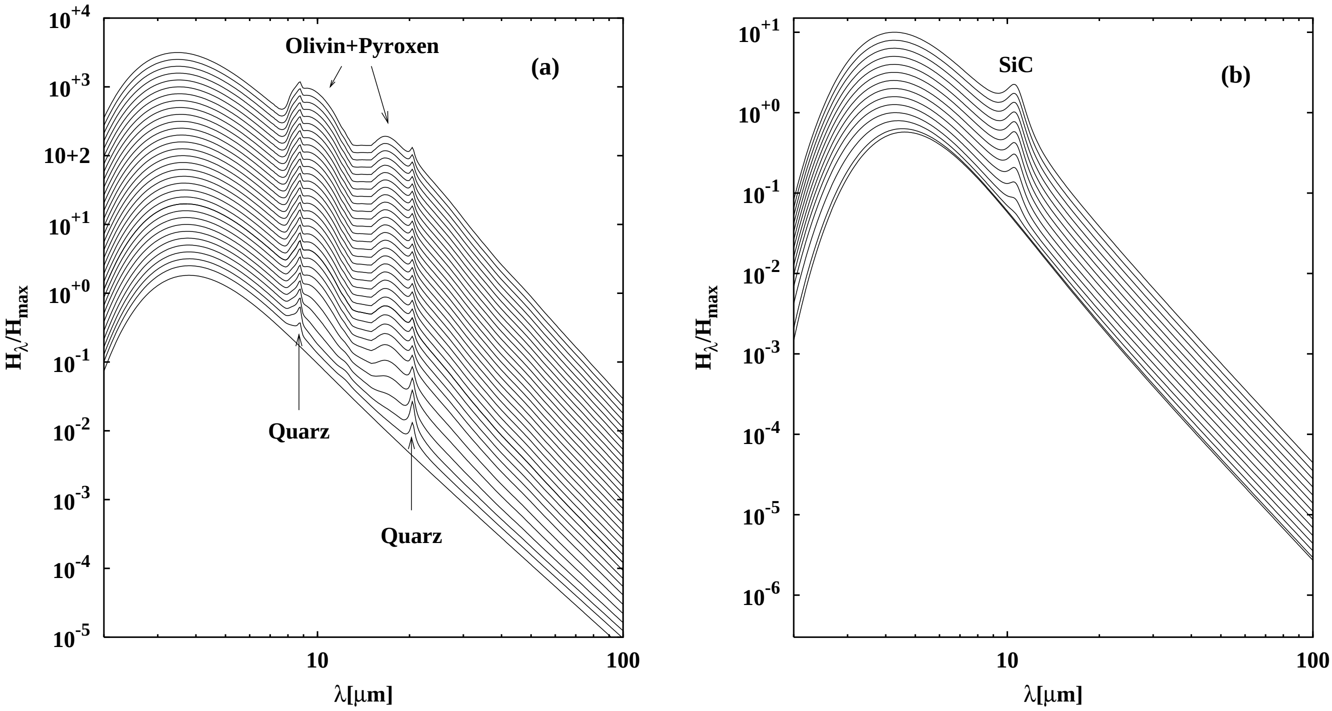

Abbildung 4.18 Syntetische Spektren für zirkumstellare Hüllen für verschiedene C/O-Verhältnisse. (a) Spektren für sauerstoffreiche Modelle mit C/O-Verhältnissen in $\Delta\epsilon_C/\epsilon_O = 0.01$ Schritten, von $\epsilon_C/\epsilon_O = 0.65$ (höchstes Spektrum) bis 0.96 und für die Häufigkeit $\epsilon_{C,crit}/\epsilon_O = 0.975$ (unten). (b) Spektren für kohlenstoffreiche Modelle mit C/O-Verhältnissen für $\epsilon_{C,crit}/\epsilon_O$ und von $\epsilon_C/\epsilon_O = 0.98$ (unten) bis $\epsilon_C/\epsilon_O = 1.10$ (oben).

S-Sterne bestimmten Staubverlustraten Werte, die näher an den Werten für M- oder C-Sterne liegen. Das gleiche gilt für die hergeleiteten Massenverhältnisse von Staub zu Gas, welche für S-Sterne als kleiner gefordert wurden (z.B. Bieging & Latter [1994], Sahai & Liechti [1995]) als für M- oder C-Sterne.

4.8 Zusammenfassung

In der Arbeit wurde der Staubbildungsprozeß in zirkumstellaren Hüllen von AGB-Sternen auf dem M-S-C-Übergang untersucht.

Durch Berechnungen der im chemischen Gleichgewicht befindlichen Mineralmischung für C/O-Häufigkeitsverhältnisse zwischen 0,65 und 1,1 wurde herausgefunden, dass festes Eisen und FeSi wohl die dominierenden Staupartikeln in den zirkumstellaren Hüllen um S-Sterne sind. Die Staubzusammensetzung unterscheidet sich erheblich von den Staubzusammensetzungen, deren Bildung üblicherweise in den zirkumstellaren Hüllen um M-Sterne (Olivin und Pyroxen) und C-Sterne (fester Kohlenstoff und SiC) beobachtet wird.

Es wurde ein Modell für die Nicht-Gleichgewichts-Kondensation von Staub in den Sternwinden von S-Sternen entwickelt. Die Staubzusammensetzung unter Nicht-Gleichgewichts-Bedingungen unterscheidet sich von der durch Gleichgewichtsrechnungen vorgegebenen, allerdings sind die dominierenden Sorten, die im Wind gebildet werden, die gleichen wie im chemischen Gleichgewicht, wenn auch in anderen Mengenverhältnissen. Die Modellrechnungen zeigen, dass festes Eisen und FeSi wohl die häufigsten Staubarten in Staubhüllen um S-Sternen sind.

Da für den warmen Staub, der in den zirkumstellaren Staubhüllen von AGB-Sternen beobachtet wird, sowohl Fe als auch FeSi elektrische Leiter sind, sollte die Infrarot-Emission aus einer Staubhülle mit dieser Zusammensetzung durch ein strukturloses Kontinuum charakterisiert werden. Die synthetischen Spektren für unsere Modelle eines stationären Windes haben gezeigt, dass die Emission von Staub um S-Sterne keine starke (Festkörper) Absorptions oder Emissionsbanden zeigen sollten, weder von Silikaten noch von SiC. Dies stimmt mit den Beobachtungsergebnissen überein.

Trotz der Ähnlichkeit der Infrarot-Spektralenergieverteilung von S-Sternen mit der von C-Sternen unterscheiden sich die Extinktionseigenschaften des Staubs in S-Sternen von denen von Kohlenstoffstaub. Die wiederholt angewendete Methode von Jura [1988] zur Bestimmung von Staub-Verlustraten und zur Herleitung von Gas/Staub-Verhältnissen daraus für S-Sterne bedarf einer Abwandlung, um die verschiedenen Extinktionseigenschaften von Staub in S-Sternen zu berücksichtigen. Masseverlustraten und Gas/Staub-Verhältnisse werden weitaus höher sein, als die derzeit bestimmten Werte.

5. Effekt der Mg/Si-Häufigkeit in AGB-Sternen

5.1 Einführung

Alle Hauptreihensterne mit Anfangsmassen von $0.5 \lesssim M_* \lesssim 8\,\mathrm{M}_\odot$ entwickeln sich schlußendlich durch das AGB-Stadium stellarer Entwicklung, kurz bevor sie zu Weißen Zwergen werden. Während dieses Entwicklungsstadiums verlieren sie durch einen Sternwind Masse mit einer extrem hohen Rate, und sie entwickeln durch Kondensation fester Teilchen im ausströmenden Gas optisch dicke Staubhüllen. Die Elementmischung in der Photosphäre des Sterns ist anfangs wie auf der Hauptreihe sauerstoffreich mit $\epsilon_\mathrm{C} < \epsilon_\mathrm{O}$. In diesem Fall erscheinen die Sterne als Riesen vom Spektraltyp M. Der Beobachtung nach bilden solche Sterne in der Ausströmung Silikatstaubteilchen, und möglicherweise bilden sie auch einige zusätzliche Minerale. Sterne mit Anfangsmassen im Bereich von $1.5 \lesssim M_* \lesssim 4.5\,\mathrm{M}_\odot$ (z.B. Groenewegen et al. [1995]) mischen nach einigen thermischen Pulsen auf dem AGB durch den dritten Dredge-up-Prozess Produkte der nuklearen Brennprozesse in ihrem Zentrum an die Oberfläche. Sie entwickeln sich über den Spektraltyp S, bei dem $\epsilon_\mathrm{C} \approx \epsilon_\mathrm{O}$, zum Spektraltyp C (manchmal auch als Spektraltyp N bezeichnet), bei dem $\epsilon_\mathrm{C} > \epsilon_\mathrm{O}$. Den Beobachtungen nach bilden die Kohlenstoffsterne in ihrer Ausströmung Ruß und Siliziumkarbidteilchen und möglicherweise einige andere feste Verbindungen.

Die chemische Zusammensetzung der kondensierenden Mineralmischung wird von der Häufigkeit solcher Elemente bestimmt, welche (i) sehr stabile feste Verbindungen bilden, die selbst bei Niedrigdruckbedingungen zirkumstellarer Staubhüllen bei Temperaturen von der Ordnung 1 000 K existieren, und welche (ii) ausreichend häufig sind, um Staub in solchen Mengen zu bilden, dass Emission durch diesen Staub messbar zur Infrarotemission der Staubhülle beiträgt. Neben den offensichtlichen Unterschieden in der Zusammensetzung zwischen den um Riesen vom Spektraltyp M oder C gebildeten dominierenden Staubverbindungen (Silikate bei M-Sternen, fester Kohlenstoff und SiC bei C-Sternen), welche von der Änderung des Kohlenstoff-Sauerstoff-Häufigkeitsverhältnisses während ihrer Entwicklung auf dem AGB beherrscht werden können dort weitere Änderungen in der chemischen Zusammensetzung des zirkumstellaren Staubs durch Häufigkeitsänderungen der anderen staubbildenden Elemente bewirkt werden. In diesem Kapitel wird die Zusammensetzung zirkumstellaren Staubs behandelt, der sich in den Hüllen um Riesensterne vom Spektraltyp M gebildet hat, bei denen sich die Häufigkeiten von C und O durch die dritten Dregde-up Episoden noch nicht merklich geändert haben.

Detailierte Häufigkeitsbestimmungen bei AGB-Sternen hinsichtlich dieser Elemente, welche die grundlegenden Staubverbindungen in AGB-Sternen vom Spektraltyp M bilden, scheinen nicht vorhanden zu sein. Die Häufigkeiten der Elemente Si, Mg und Fe und bis zu einem gewissen Maß auch von Al, Ca und Ni sind aber von besonderem Interesse für die Staubbildung um M-Sterne. Glücklicherweise sind die elektrischen Kernladungen dieser Elemente groß genug, dass die Kerne während der Sternentwicklung zu und auf dem AGB durch nukleare Prozesse in den stellaren Brennzonen nicht beeinflußt werden. Die Temperaturen in der Brennzone sind für eine effiziente Reaktion von Mg, Si und Fe viel zu niedrig. Zusätzlich haben die Kerne der Elemente leichter als Fe kleine Wirkungsquerschnitte beim Neutroneneinfang, sodass sich die Gesamthäufigkeiten der leichten Elemente auch nicht durch den auf dem thermisch pulsenden AGB wirksamen s-Prozess bedeutend ändern. Desweiteren verbraucht der s-Prozess nur einen kleinen Teil des Fe, um die schweren s-Prozess-Kerne zu bilden. Dies ermöglicht die Nutzung von Häufigkeitsbestimmungen von Hauptreihensternen, wenn man die Häufigkeiten der staubbildenden Elemente auf dem AGB benötigt.

Für galaktische F- und G-Sterne sind systematische Untersuchungen der Elementhäufigkeiten von Hauptreihensternen und ihre Abhängigkeit von der Metallizität, große Stichproben inbegriffen, verfügbar. Dieser Spektralklassenbereich und der damit verbundene Bereich der Hauptreihensternmassen ist enger als der Massenbereich der Vorläufer von AGB-Sternen, welche grob Hauptreihensternen vom Spektraltyp spätes K bis B3 (Lang [1992]) entsprechen. Jedenfalls sollten Sterne gleicher Metallizität, d.h. gebildet in etwa dem gleichen chemischen Entwicklungszeitraum der Galaxis, alle mit der gleichen chemischen Anfangszusammensetzung (und den gleichen Häufigkeitsvariationen, sofern vorhanden) entstanden sein, unabhängig von ihren Anfangsmassen. Somit kann man die Häufigkeiten der staubbildenden Elemente in F- und G-Hauptreihensternen als repräsentativ (bei gleicher Metallizität) für die Häufigkeiten dieser Elemente in AGB-Sternen ansehen. Es wird abgesehen von den kleinen Metallizitätsgradienten in der Galaxis, welche eine einfache Alter-Metallizität-Zuordnung etwas schwierig gestalten.

Zwei zu diesem Zweck besonders nützliche Untersuchungen sind die Häufigkeitsbestimmungen von Edwardson et al. [1993] und Chen et al. [2000], welche für eine ziemlich große Sternzahl die Häufigkeiten der Elemente, die Hauptsächlich von Interesse sind, angeben. Ihre Ergebnisse zeigen, dass die Häufigkeiten der staubbildenden Elemente Si, Fe, Al und Ca eine ziemlich systematische Veränderung mit der Metallizität aufweisen und eine Streuung der Häufigkeiten bei einzelnen Sternen um das Mittel, die bei den meisten Elemente jedoch gering ist. Man kann durch solch begrenzte Häufigkeitsschwankungen keine drastischen Schwankungen der chemischen Zusammensetzung der Staubmischung erwarten. Eine wichtige Ausnahme ist Magnesium, welches bei einzelnen Sternen eine sehr große Streuung der Mg-Häufigkeit aufweist. Diese starke Streuung einzelner Mg-Häufigkeiten steht in scharfem Kontrast zu einer eher gleichförmigen Si-Häufigkeit aller Sterne mit gleicher Metallizität. Da Mg und Si die beiden wichtigsten Bestandteile für die Bildung von Silikatstaub in M-Sternen darstellen, mag dies ernste Folgen für die chemische Zusammensetzung des von diesen Sternen gebildeten Staubs haben.

Tabelle 5.1: Elementhäufigkeiten, die in der Kondensationrechnung benuzt wurden. Letzte Spalte zeigt die Solarhäufigkeiten.

El.	$\epsilon_{\text{AGB-Stern}}$	ϵ_{solar}
He	$1.04\,10^{-1}$	$9.75\,10^{-2}$
C	$2.33\,10^{-4}$	$3.55\,10^{-4}$
N	$2.52\,10^{-4}$	$9.33\,10^{-5}$
O	$6.87\,10^{-4}$	$7.41\,10^{-4}$

Die Untersuchungen von Edwardson et al. [1993] und Chen et al. [2000] weisen darauf hin, dass die Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse der meisten Sterne mit Population I und Population II Metallizitäten im Intervall $1 \lesssim \epsilon_{\text{Mg}}/\epsilon_{\text{Si}} \lesssim 1.5$ gleichverteilt sind. In diesem Fall ist ausreichend Magnesium verfügbar, um das Silizium vollständig in Magnesium-Silikat-Staub zu kondensieren. Ein Bruchteil von $\lesssim 10\%$ aller Sterne mit Population I und Population II Metallizität scheinen jedoch geringere Magnesiumhäufigkeiten als deren Siliziumhäufigkeiten aufzuweisen, in einigen extremen Fällen scheint das Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis so gering wie 0.6 zu sein, während z.B. nach Anders and Grevesse [1989] das Sonnensystem ein Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis von 1.08 hat und die Daten von Snow and Witt [1996] für das interstellare Medium Mg/Si=1.34 zeigen. Bei Mg/Si-Häufigkeitsverhältnissen kleiner als Eins kann das Si nicht vollständig in Magnesiumsilikaten gebunden werden und es müssen sich einige andere Staubarten bilden. Es soll gezeigt werden, dass sich in diesem Fall Quarz als eine zusätzliche Staubart bildet.

In diesem Kapitel werden die Folgen berücksichtigt, die sich aus den großen Schwankungen der Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse für die chemische Zusammensetzung des Staubs in zirkumstellaren Hüllen von Objekten mit sauerstoffreicher Chemie ergeben. S- und C-Sterne werden in diesem Kapitel nicht berücksichtigt. Die allgemeinen Grundsätze der Berechnung von Nichtgleichgewichts-Staubbildung sind in Gail & Sedlmayr [1999] diskutiert.

5.2 Elementhäufigkeit auf dem AGB

Die Elementhäufigkeiten der leichtesten und der schwersten Elemente unterscheiden sich auf dem AGB von den Häufigkeiten dieser Elemente in den Vorläufersternen auf der Hauptreihe signifikant, da Material aus nuklearen Prozessen aus der Brennzone in die Sternoberfläche gemischt wird. Die ersten und zweiten *„dredge up“* Prozesse am unteren Ende des Roten-Riesenastes (erster dredge up) und am unteren Ende des Asymptotischen Riesenastes (zweiter dredge up) verändern die Häufigkeiten von He und CNO durch das Mischen von Material, das im CNO-Zyklus H zu He gebrannt hat, in die Sternhülle. Dies erhöht ein wenig die He-Häufigkeit. Da der Bestand an C-, N- und O-Kernen während dem Wasserstoffbrennen durch den CNO-Zyklus in die Gleichgewicht-Mischung umgewandelt wird, d.h. hauptsächlich in ^{14}N, erhöht das Mischen dieses Materials in die Hülle die N-Häufigkeit und senkt die C- und

O-Häufigkeiten. Nach dem *„zweiten dredge up“* erwartet man eine wie in Tab. 5.1 gezeigte Zusammensetzung. Die ‘solaren’ Werte in der Tabelle entsprechen den von Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993] angegebenen Häufigkeiten. Die ‘AGB’-Werte werden wie folgt bestimmt: die Standardhäufigkeiten von He, C, N und O wurden entsprechend den Änderungen der Häufigkeiten in den Sternoberflächen skaliert, die für Sterne kleiner und mittlerer Massen in den Entwicklungsrechnungen von Schaller et al. [1992] ermittelt wurden. Die auf diese Weise bestimmten CNO-Häufigkeiten stimmen in AGB-Sternen, wie in Smith & Lambert [1990] gegeben, mit den durch Beobachtung bestimmten mittleren Häufigkeiten dieser Elemente gut überein.

Wenn der Stern den oberen ABG erreicht, tritt in irgendeinem Augenblick der erste thermische Puls auf. Nach einigen Pulsen beginnt der dritte dredge up, der (i) frisch produzierten Kohlenstoff aus dem He-Brennen und (ii) frisch produzierte s-Prozess-Elemente in die Hülle mischt. Dies wandelt nach wenigen Pulszyklen die Chemie der Sternoberfläche für alle Sterne, deren Anfangsmasse zwischen $\approx 1\,M_\odot$ und $\approx 4.5\,M_\odot$ liegt, von einer sauerstoffreichen in eine kohlenstoffreiche Mischung um. Sterne mit geringeren Anfangsmassen werden möglicherweise niemals zu C-Sternen. Massereichere Sterne wandeln den Kohlenstoff, der aus der He-Brennzone in die untere Region der äußeren Hülle gemischt wird, mittels H-Brennen durch den CNO-Zyklus in N um (der ‘hot bottom burning’ Prozess) und erhalten sich ihre sauerstoffreiche Oberflächenchemie (siehe Lattanzio & Forestini [1999]).

Die Häufigkeiten von Kernen mit Massen, die zwischen der leichter Kerne, die am CNO-Zyklus und seinen Seitenreaktionen beteiligt sind, und der schwerer Kerne jenseits des Eisenspitze, liegen, werden in AGB-Sternen durch nukleare Brennprozesse nicht beeinflußt. Die Zentraltemperaturen in AGB-Sternen sind, außer für die leichtesten Kerne, zu niedrig für Protoneneinfang, und die Kerne mit mittlerer Masse bis etwa zur Eisenspitze haben kleine Neutroneneinfangswirkungsquerschnitte und nehmen nicht am *s*-Prozess teil. Das bedeutet, dass die Häufigkeiten der häufigen Isotope der Elemente von Mg bis Ni durch nukleare Prozesse auf dem AGB nicht signifikant beeinflußt werden. Diese Kerne werden hauptsächlich in Supernovae erzeugt. Nur einige seltene Isotope unterlaufen bedeutende Häufigkeitsänderungen. Es bildet sich beispielsweise das langlebige instabile ^{26}Al Isotop (Forestini & Charbonnel [1997]). Die Gesamthäufigkeiten der Elemente von Mg bis Ni sind in AGB-Sternen nahezu identisch mit ihren Anfangshäufigkeiten aus der Entstehungszeit des Vorläufersterns.

Bezüglich der Staubbildung in zirkumstellaren Hüllen von AGB-Sternen sind nur die folgenden Elemente von Interesse: C, N, O, Mg, Al, Si, S, Ca, Fe, und Ni, da nur diese ausreichend häufig sind, um an der Bildung beobachtbarer Staubmengen teilzuhaben. Weniger häufige Elemente wie Ti, V und Zr können allerdings für die Bildung von Keimen wichtig sein.

Häufigkeitsbestimmungen der Elemente Mg, Al, Si, S, Ca, Fe, und Ni sind für AGB-Sterne selten. Die kürzliche Arbeit von Edwardsson et al. [1993] mit den Verbesserungen von Tomkin et al. [1997] geben für eine große Stichprobe galaktischer F- und G-Zwergsterne die Häufigkeiten der hier interessanten Elemente an. Die Arbeit von Chen et al. [2000] gibt die Häufigkeiten der relevanten Elemente für eine beträchtliche Zahl weiterer F- und G-Zwerge an. Die einzige Ausnahme ist das Element S, für welches keine Häufigkeitsbestimmungen angegeben sind. Schwefel spielt jedoch

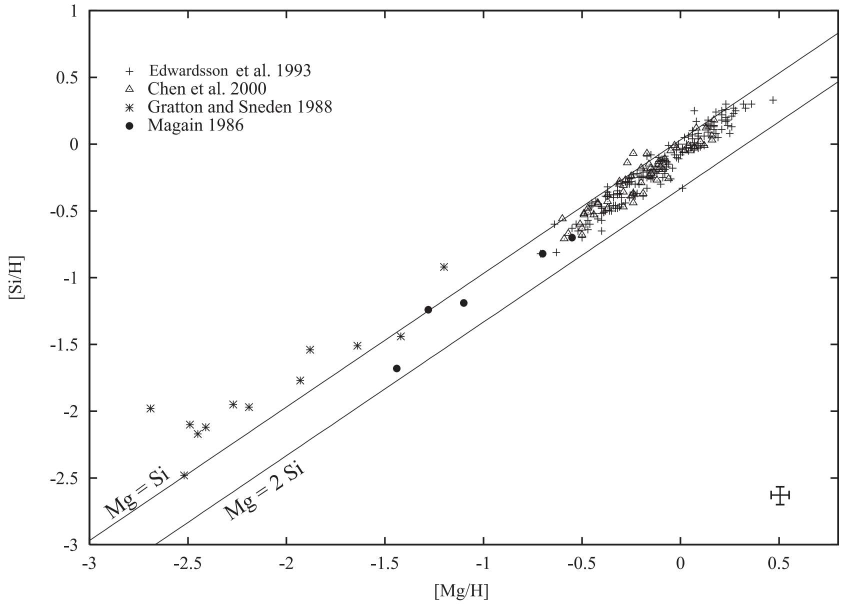

Abbildung 5.1 Magnesium und Silizium-Häufigkeiten in galaktischen F und G Zwergsternen. Die zwei Linien entsprechen $\epsilon_{\mathrm{Mg}} = \epsilon_{\mathrm{Si}}$ und $\epsilon_{\mathrm{Mg}} = 2\epsilon_{\mathrm{Si}}$. Diese Linien begrenzen den Bereich der Koexistenz von Forsterit (Olivin) und Enstatit (Pyroxen).

wahrscheinlich keine Rolle bei der Staubbildung von M-Sternen (mag aber bei der von C-Sternen wichtig sein). Bei den Sternen, die beiden Arbeiten gemeinsam sind, wurden die Daten von Edwardsson et al. [1993] und Tomkin et al. [1997] verwendet, da für die einzelnen Sterne die Unterschiede in den Häufigkeiten für beide Sätze von Häufigkeitsbestimmungen recht gering sind. In Edwardsson et al. [1993] wurde der Fehler in der Häufigkeitsbestimmung für einzelne Sterne zu meist von der Ordnung $\pm 0.05 \ldots 0.1$ dex bestimmt, die Fehler in Chen et al. [2000] sind von der gleichen Größenordnung. Die Abbildung (5.1) zeigt die Korrelation zwischen den Häufigkeitsverhältnissen [Si/H] und [Mg/H], welche von speziellem Interesse für die Silikatstaubbildung sind, der 235 Sterne aus den Arbeiten von Edwardsson et al. oder Chen et al., in denen sowohl Mg- als auch Si-Häufigkeiten bestimmt werden.

Die Häufigkeiten einiger sehr metallarmer Sterne wurden von Gratton & Sneden [1988] und Magain [1987] angegeben. Die Fehler der Häufigkeitsbestimmungen sind jedoch viel größer als jene der oben erwähnten Arbeiten (bis zu 0.15 in Gratton & Sneden und bis zu 0.26 in Magain). Die Abbildung (5.1) zeigt zum Vergleich auch die Verhältnisse [Si/H] und [Mg/H] von 18 sehr metallarmen Sternen.

Die Zusammensetzung der Hauptbestandteile des Staubs in M-Sternen wird durch die Häufigkeiten der drei Elemente Si, Mg und Fe bestimmt. In diesen Sternen ist die Sauerstoffhäufigkeit um so viel höher als die von Si, Mg und Fe, dass die Bildung von Oxidverbindungen nicht durch die Menge verfügbaren Sauerstoffs begrenzt ist. Die Abbildung (5.1) zeigt die Korrelation zwischen den Häufigkeiten [Si/H] und [Mg/H] für 177 Sterne aus Edwardsson et al. [1993] und Tomkin et al. [1997], 58 Sterne aus Chen et al. [2000], 13 Sterne aus Gratton und Sneden [1988] und 5 Sterne aus Magain [1987]. Zusätzlich zeigt die Abbildung die zwei Linien, an denen $\epsilon_{\mathrm{Mg}} = \epsilon_{\mathrm{Si}}$ und $\epsilon_{\mathrm{Mg}} = 2\epsilon_{\mathrm{Si}}$. Bei Sternen mit Population I und Population II Metallizitäten (die Arbeiten von Edwardsson et al. und Chen et al.) ist, wie klar erkennbar, das Häufigkeitsverhältnis

$\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si}$ der meisten Sterne stark in dem Bereich $1.0 \leq \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} \leq 1.5$ konzentriert. Ein kleiner Teil der Sterne ($\lesssim 10\%$) besitzen kleinere Mg-Häufigkeiten als die Si-Häufigkeit, bis hinunter zu $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} \approx 0.6$. Nur ein Stern scheint eine Mg-Häufigkeit zu besitzen, die das Doppelte der Si-Häufigkeit ein wenig übertrifft. Wie man unten sehen wird, korrespondieren die beiden Grenzen $\epsilon_{\rm Mg} = \epsilon_{\rm Si}$ und $\epsilon_{\rm Mg} = 2\epsilon_{\rm Si}$ mit den Grenzen, an denen eine Änderung der Mineralzusammensetzung des zirkumstellaren Staubs zu erwarten ist.

Bei den sehr metallarmen Sternen (die Arbeiten von Gratton & Sneden, Magain) scheint die Mg-Häufigkeit generell unter der Si-Häufigkeit zu liegen, in vielen Fällen sogar weitaus darunter. Im Folgenden werden diese Sterne nicht berücksichtigt, da es nicht klar ist, ob sie in ihrem Sternwind Staub bilden, wenn Sterne mit solch geringer Metallizität das AGB-Stadium der Sternentwicklung erreichen.

Das Kreuz in der unteren rechten Ecke von Abb. (5.1) zeigt den erwarteten maximalen Fehler der Häufigkeitsbestimmungen aus Edwardsson et al. [1993] und Chen et al. [2000]. Die Streuung der Mg/Si-Häufgikeitsverhältnisse übertrifft die Fehler in den Häufigkeitsbestimmungen beträchtlich. Dies weist auf große Stern-zu-Stern-Schwankungen des Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisses hin. Solche Schwankungen können beispielsweise aus starken Schwankungen der Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse im Auswurf von Typ II Supernovae (z.B. Thielemann et al. [1993]) und unvollständiger Durchmischung interstellaren Materials folgen oder von schwankenden Materialverteilungen aus Typ Ia Supernovae, welche sehr metallarm sind (z.B.Thielemann et al. [1993]). Die Diffusion der Sterne in der galaktischen Scheibe kann Sterne aus Bereichen unterschiedlicher Metallizität miteinander vermischen und dadurch ebenfalls zu den beobachteten Streuungen beitragen (Edwardsson et al. [1993]). Es kann erwartet werden, dass die AGB-Riesensterne, welche von solchen Zwergsternen abstammen, die gleichen Schwankungen in den Mg/Si-Häufigkeitsverhältnissen zeigen. Da dieses Verhältnis die Zusammensetzung der Staubmischung in der Staubhülle eines AGB-Sterns bestimmt, können beträchtliche Schwankungen in der Zusammensetzung der Mineralmischung erwartet werden.

5.3 Gleichgewichtskondensation von Staub

Staubkondensation tritt in zirkumstellaren Staubhüllen unter Bedingungen fern von chemischem Gleichgewicht auf. Nichtsdestotrotz ist die Betrachtung des Prozesses der Gleichgewichtskondensation nützlich, um die stabilsten Kondensate zu bestimmen, da diese auch als wahrscheinliche Kandidaten bei der Kondensation im Nicht-Gleichgewichtszustand erwartet werden. So wird mit einer Bestimmung der Zusammensetzung der Gleichgewichtsmineralmischung begonnen, wenn beträchtliche Abweichungen des Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisses von seinem Wert von 1.075 der solaren Elementhäufigkeit auftreten.

5.3.1 Gleichgewichtskondensation von Si–Fe–Mg–Verbingungen

Die hauptsächlichen Staubverbindungen in AGB-Sternen vom Spektraltyp M sind diejenigen, die sich aus den häufigsten Elementen, d.h. Si, Mg und Fe, gebildet haben. Sie bilden zusammen mit Sauerstoff einige sehr stabile Verbindungen mit hohen Schmelz- und Siedetemperaturen. Die weniger häufigen Elemente Al, Ca, Na, Ti, Zr bilden einige Kondensate, die sogar noch stabiler als die Magnesium-Eisen-Silizium-Verbindungen sind. Ihre Häufigkeiten sind jedoch zu gering, um Staub in Mengen zu bilden, die durch einen Beitrag solcher Staubarten zur Infrarotemission aus der zirkumstellaren Staubhülle einfach zu messen sind. Einige von ihnen können allerdings für die Bildung von Keimen wichtig sein.

Zahlreiche Berechnungen von Kondensationsreihen (z.B. Grossman [1972]; Lattimer, Schramm & Grossman [1978]; Saxena & Ericksson [1986]; Sharp & Huebner [1990]; Lodders & Fegley [1995]; Lodders & Fegley [1999]; Ebel & Grossman [2000]) zeigten für die kosmische Standardelementmischung, dass im chemischen Gleichgewicht Forsterit mit der Zusammensetzung Mg_2SiO_4, Enstatit mit der Zusammensetzung $MgSiO_3$ und freies metallisches Eisen die stabilsten Kondensate der häufigen Elemente sind. Die Elementmischung, die in solchen Rechnungen verwendet wird, entspricht einem Magnesium-Silizium-Häufigkeitsverhältnis von $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} = 1.075$ bei der kosmischen Standardelementmischung, sofern die letzten Häufigkeitstabellen von Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993] verwendet werden, oder einem nahen Wert bei Verwendung anderer Tabellenwerte.

Berücksichtigt man in einer Rechnung im thermodynamischen Gleichgewicht, dass Forsterit und Enstatit Mischkristalle mit ihren Eisen enthaltenden Gegenstücken, Fayalit mit der Zusammensetzung Fe_2SiO_4 und Ferrosilit mit der Zusammensetzung $FeSiO_3$, bilden, stellt sich heraus, dass im Gleichgewicht nicht die reinen Endprodukte der zwei Mischkristalle die stabilsten Verbindungen sind, sondern sich Olivin mit der Zusammensetzung $Mg_{2x}Fe_{2(1-x)}SiO_4$ und Pyroxen mit der Zusammensetzung $Mg_xFe_{1-x}SiO_3$ bilden. Jedenfalls ist der Eisengehalt im Gleichgewicht gering, d.h. $(1-x) \ll 1$ (z.B. Saxena & Ericksson [1986]). In den folgenden Betrachtungen werden die geringen Mengen an Eisen, die in Olivin und Pyroxen gebunden sind, vernachlässigt und nur die reinen Verbindungen Forsterit und Enstatit berücksichtigt.

Im chemischen Gleichgewicht erhält man eine Mischung aus Forsterit und Enstatit nur, wenn das Magnesium-Silizium-Verhältnis die Ungleichung $1 < \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} < 2$ erfüllt. Im Prinzip ist Forsterit stabiler als Enstatit, Forsterit benötigt aber zu seiner Bildung zwei Mg-Atome auf ein Si-Atom im Gegensatz zu Enstatit, welches nur eines benötigt. Ist $1 < \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} < 2$, dann ist in der Elementmischung zu wenig Mg verfügbar, um alle Si-Atome in das stabilere Forsterit zu kondensieren. In diesem Fall bilden sich Forsterit und ein wenig Enstatit in solchen Mengen, dass Forsterit und Enstatit bei niedrigen Temperaturen das gesamte verfügbare Silizium und Magnesium aufbrauchen.

Ist $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} > 2$, dann ist in der Mischung mehr Magnesium vorhanden als in Forsterit gebunden werden kann. In diesem Fall bildet sich kein Enstatit und das überschüssige Magnesium bildet eine andere stabile Verbindung, welche sich als festes MgO herausstellt, von dem bekannt ist, dass es bis zu hohen Temperaturen sehr stabil ist.

Ist $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} < 1$, dann sind ungenügende Mengen an Magnesium verfügbar, damit das gesamte Silizium zu Enstatit kondensiert. Bei niedrigen Temperaturen braucht in diesem Fall die Bildung von Enstatit das gesamte Magnesium auf und es bildet sich kein Forsterit. Das übriggebliebene Silizium bildet eine andere stabile Siliziumverbindung. Es stellt sich heraus, dass es in diesem Fall Quarz ist, welches ebenfalls eine ziemlich stabile Verbindung ist.

Die Haupteigenschaften der Mineralmischung, die sich bei unterschiedlichen Magnesium-Silizium-Häufigkeitsverhältnissen bildet, werden durch stöchiometrische Bedingungen bestimmt, um Mg und Si zwischen der stabilsten (Forsterit) und zweitstabilsten (Enstatit) Magnesium-Silizium-Verbindung aufzuteilen, welche in dem Häufigkeitsverhältnisintervall $1 < \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} < 2$ ihrer Koexistenz Mg und Si vollständig aufbrauchen. Nur außerhalb dieses Bereiches können sich andere Si oder Mg enthaltende Verbindungen bilden. Weitere Details der Gleichgewichtskondensation müssen aus einer Berechnung der Gleichgewichtsmineralmischung durch die Methoden der chemischen Thermodynamik bestimmt werden.

Die weniger häufigen Elemente Al und Ca bilden zusammen mit Si, Mg und O einige sehr stabile Verbindungen. In dem Temperaturbereich, in dem Forsterit stabil ist, sind dies hauptsächlich Spinel ($MgAl_2O_4$) und Diopsid ($CaMgSi_2O_6$) oder Anorthit ($CaAl_2Si_2O_8$). Ihre Bildung verbraucht einen Teil der Elemente Mg und und Si, welcher der Bildung anderer Magnesium- und Siliziumverbindungen dann nicht zur Verfügung steht, da diese Al- und Ca-Verbindungen stabiler sind. Dies verschiebt die oben genannten Grenzen des Magnesium-Silizium-Häufigkeitsverhältnisses zu etwas geringeren Werten ohne das Gesamtbild zu verändern. Es wird daher der Einfachheit halber willkürlich angenommen, dass Al und Ca vollständig in Spinel und Diopsid kondensieren, und es werden die Details der Al-Ca-Chemie (und der weniger häufiger Elemente) nicht berücksichtigt, da diese für die Zwecke dieser Arbeit unwichtig sind.

5.3.2 Berechnung der chemischen Gleichgewichte

Die chemische Zusammensetzung einer Festkörper-Gas-Mischung in einer zirkumstellaren Hülleist aus zwei Gleichungssätzen berechnet worden:

- Dem Massenwirkungsgesetz für jede einzelne Substanz, und
- den Nebenbedingungen für die Häufigkeit der Elemente.

Das Prinzip dieser Berechnung ist im Kapitel 4 beschrieben.

5.3.3 Ergebnisse für die Mineralmischung

Die Ergebnisse für die Mineralzusammensetzung, die sich bei unterschiedlichen Magnesium-Silizium-Häufigkeitsverhältnissen im chemischen Gleichgewicht bilden, sind in Abb. (5.2) dargestellt. Der gesamte Gasdruck wird zu $P = 10^{-4}\,{\rm dyn\,cm^{-2}}$ angenommen, was für den Gasdruck in der Kondensationszone zirkumstellarer Staubhüllen repräsentativ ist (siehe z.B. Abb. 7 in Gail & Sedlmayr [1999]). Die Elementhäufigkeiten sind die aus Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993] mit der Ausnahme, dass das Mg/Si-Verhältnis in den Grenzen $0.6 \le \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} \le 2.4$ variiert wurde, welche den Bereich der Mg/Si-Verhältnisse mit einschließen, der in AGB-Sternen auftreten kann.

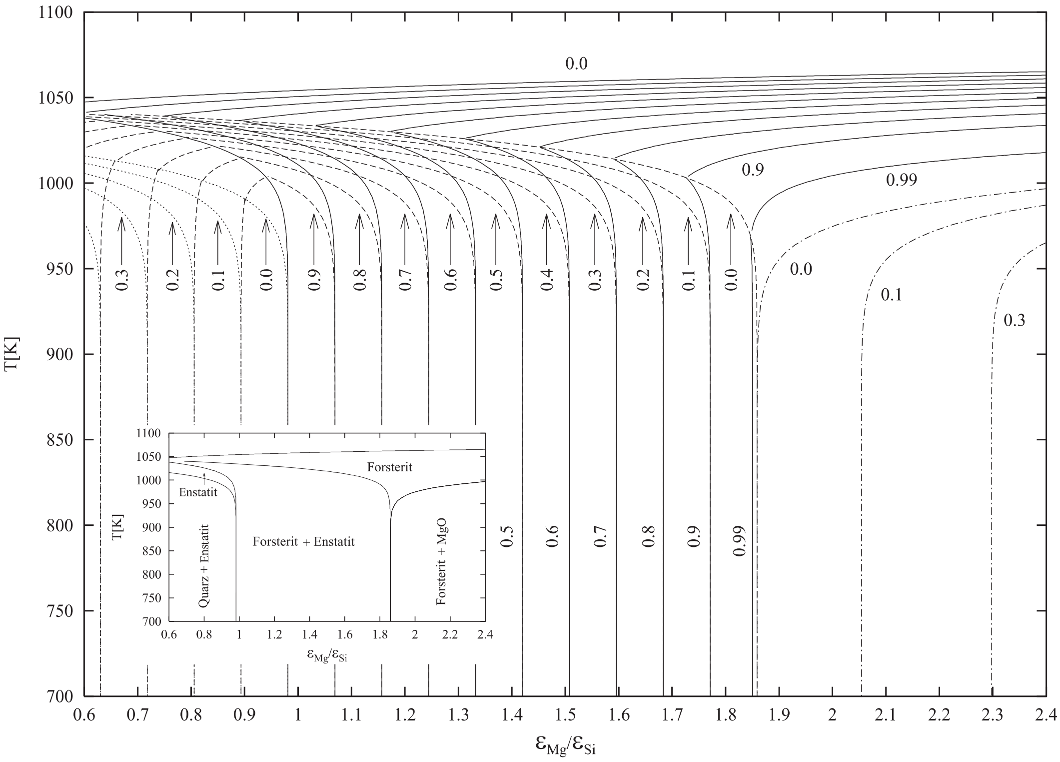

Abbildung 5.2 Linien konstanten Kondensationsgrads der häufigen Magnesium und Siliziumverbindungen bei $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} für unterschiedliche Werte des Mg/Si Häufigkeitsverhältnisses. *Durchgezogene Linien:* Forsterit. *Gestrichelte Linien:* Enstatit. *Gepunktete Linien:* Quarz. *Gestrichelte gepunktete Linien:* MgO. Die Zahlen bezeichen den Kondensationsgrad des Schlüsselelements (Si für Forsterit, Enstatit und Quarz, Mg für MgO) in dem Festkörper. Die kleine Abbildung links zeigt die Stabilitätsgrenzen der verschiedenen Kondensate und die Regionen, in denen die verschiedenen Mineralmischungen koexistieren. Es wurde angenommen, dass ein Teil des Si sowie des Mg in Spinel und Diopsid gebunden sind.

Die Abbildung (5.2) zeigt die Stabilitätsgrenzen und Existenzbereiche der verschiedenen Mg-Si-Kondensate. Die stabilste Verbindung bei jedem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis ist Forsterit und die oberste Linie entspricht seiner Stabilitätsgrenze. Oberhalb dieser Grenze existiert keines der häufigen Mg-Si-Kondensate außer den viel weniger häufigen Al-Ca-Kondensaten. Die obere Stabilitätsgrenze von Enstatit tritt bei einer etwas niedrigeren Temperatur auf. In dem Häufigkeitsverhältnisintervall $1 \lessapprox \epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \lessapprox 2$ existieren Enstatit und Forsterit bei allen Temperaturen unter der Stabilitätsgrenze von Enstatit gemeinsam, und in dem Häufigkeitsverhältnisbereich $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \lessapprox 1$ existieren sie nur in einem kleinen Temperaturstreifen direkt unter der Stabilitätsgrenze von Enstatit gemeinsam. In dem Bereich $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \lessapprox 1$ verschwindet das Forsterit bei einer bestimmten Grenztemperatur, da unterhalb dieser Grenze das Enstatit das gesamte verfügbare Mg aufbraucht.

In dem Häufigkeitsverhältnisbereich $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \lessapprox 1$ bildet sich Quarz, da nur ein Teil des Si in Enstatit gebunden werden kann. Aufgrund der bedeutend geringeren Stabilität von Quarz im Vergleich zu den Magnesiumsilikaten taucht die obere Stabilitätsgrenze von Quarz etwa 30 K unterhalb der Grenze auf, an der Forsterit verschwindet. So gibt es einen kleinen Zwischenbereich, in dem nur Enstatit existiert. In dem Häufigkeitsverhältnisbereich $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} > 1$ gibt es in der Gleichgewichtsmineralmischung keinen Quarz, weil Si die stabileren Minerale Forsterit und Enstatit bildet.

In dem Häufigkeitsverhältnisbereich $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} \gtrsim 2$ bildet sich festes MgO, da nur ein Teil des Mg in Forsterit gebunden werden kann. MgO verbraucht dann das überschüssige Mg, das nicht in Forsterit gebunden ist, auf.

Die Abbildung (5.2) zeigt Linien konstanter Kondensationsgrade f der häufigen Staubarten zwischen der Stabilitätsgrenze $f = 0$ und der Grenze nahezu vollständiger Kondensation $f = 0.99$, aus denen die Details des Gleichgewichtskondensationsprozesses ersehen werden können. Es ist zu beachten, dass f für ein bestimmtes Kondensat so definiert ist, dass er den Anteil des Schlüsselelements beschreibt, der zu seiner Bildung benötigt wird und in dem Kondensat gebunden ist. Als Schlüsselelement von Quarz, Forsterit und Enstatit wurde Si gewählt, von festem MgO ist Mg das Schlüsselelement. Besonders in Abb. (5.2) kann man sehen, wie im chemischen Gleichgewicht das Silizium und Magnesium in dem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisbereich $1 \lesssim \epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} \lesssim 1.5$, der in der Mehrzahl der Sterne angetroffen wird, zwischen Forsterit und Enstatit aufgeteilt wird.

Die Stabilitätsgrenze und der Kondensationsgrad von festem Eisen wurden nicht dargestellt, da Eisen bei einer Temperatur etwas unterhalb der von Olivin unabhängig von den anderen Mineralen kondensiert (siehe Abb. 2 in Gail & Sedlmayr [1999]).

In zirkumstellaren Teilchen ist der Eisengehalt normalerweise ungleich Null, doch sein genauer Wert ist unbekannt. Daher müssen im folgenden nicht die reinen Endprodukte Forsterit und Enstatit ihrer jeweiligen Mischungsreihen betrachtet werden, sondern die entsprechenden Eisen enthaltenden Mischkristalle Olivin und Pyroxen.

5.4 Nicht-Gleichgewichts Kondensation

Es werden Modelle zu der Bildung von Staub in einer sphärisch symmetrischen Ausströmung aus einem nicht-veränderlichen Stern gerechnet. In Anbetracht der Tatsache, dass die meisten kühlen Riesen auf dem AGB reguläre oder semireguläre Veränderliche sind, bei denen regelmäßig Schockwellen die äußeren Schichten des Sterns durchqueren, ist diese Annahme hochgradig idealisiert. Eine realistische Behandlung von Staubbildungsproblemen inklusive stellarer Pulsation ist jedoch gegenwärtig nicht möglich. Und stationäre Modelle, wie das, welches im folgenden betrachtet wird, sind gut geeignet, um die Grundprinzipien der Staubbildung in zirkumstellaren Hüllen zu untersuchen. Ein Vergleich einiger Ergebnisse einer Modellrechnung (Winters et al. [1997]) für ein zeitabhängiges Modell der Staubkondensation in einem Kohlenstoffstern (eine Staubart) mit Ergebnissen eines Modells, das auf einer stationären Ausströmung basiert, zeigt, dass sich die globalen Eigenschaften stationärer Modelle nicht sehr von jenen solcher Modelle, die Pulsation beinhalten, unterscheiden, obwohl die Details gänzlich verschieden sind. Stationäre Modelle sind allerdings für die leuchtkräftigeren Überriesen angemessen, bei denen die Veränderlichkeit nicht so wichtig ist wie auf dem AGB (Le Bertre & Winters [1998]).

5.4.1 Das Windmodell

Das Modell des Sternwinds ist das in Gail & Sedlmayr [1999] beschriebene vereinfachte Modell: Es wird angenommen, dass das Gas mit einer konstanten Geschwindigkeit v_0 von der Ordnung der Schallgeschwindigkeit solange in die staubbildende Schicht der zirkumstellaren Hülle strömt, wie die gravitative Anziehung des Sterns auf die Gas-Staub-Mischung den Strahlungsdruck überwiegt. Sobald das Verhältnis

$$\Gamma = \frac{L_*}{4\pi\, c\, G\, M_*}\, \kappa \tag{5.1}$$

von Strahlungs- zu Gravitationsbeschleunigung 1 übersteigt, wird die Bewegungsgleichung

$$v\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}r} = -\frac{GM_*}{r^2}\,(1-\Gamma) \tag{5.2}$$

der Ausströmungsgeschwindigkeit v, welche der Anfangsbedingung

$$v = v_0 \quad \text{bei} \quad \Gamma(r) = 1\,. \tag{5.3}$$

unterliegt, gelöst. M_* ist die Sternmasse und L_* die stellare Leuchtkraft. Es ist zu beachten, dass sich Γ mit dem Abstand von dem Stern ändert. In dem staubfreien Gebiet hat man $\Gamma \ll 1$, nach Einsetzen der Staubbildung steigt Γ schnell zu Werten von $\Gamma > 1$.

In der Bewegungsgleichung (5.2) wird der Druckgradient vernachlässigt, um die notwendige Integration durch die singuläre Stelle in der Geschwindigkeitsgleichung, wie sie beispielsweise in Gail & Sedlmayr [1987] durchgeführt wurde, zu vermeiden. Die explizite Berücksichtigung der singulären Stelle ist eine unnötige Komplikation, wenn die Details der Staubnukleation — so wie in dieser Arbeit — vernachlässigt werden.

Die Massendichte in der Ausströmung wird aus der Kontinuitätsgleichung (Massenerhaltungsgleichung)

$$\rho = \frac{\dot{M}}{4\pi\, r^2 v}\,. \tag{5.4}$$

berechnet. $\dot{M}$ ist die Massenverlustrate durch die stationäre Ausströmung.

Die Parameter des Windmodells sind M_*, L_*, $\dot{M}$, und v_0. Die Parameterwahl wird durch den Umstand diktiert, dass Massenverlust und Staubbildung auf dem AGB betrachtet werden. Es sollen insbesondere die Folgen von Änderungen im Häufigkeitsverhältnis von Mg zu Si auf die Staubbildung in zirkumstellaren Hüllen von AGB-Sternen untersucht werden. In dieser Modellrechnung wird eine Sternmasse von $M_* = 1.0\,\mathrm{M}_\odot$ angenommen, was am unteren Ende für die Anfangsmassen von AGB-Sternen angesiedelt ist, jedoch berücksichtigt, dass die Sterne, die von Interesse sind, bereits durch einen massiven Sternwind einen Teil ihrer Masse verloren haben. Starke Massenverluste und zirkumstellare Staubhüllen werden bei AGB-Sternen beobachtet, wenn ihre Leuchtkraft bis zu $\gtrsim 10^4\,\mathrm{L}_\odot$ angestiegen ist. In dieser Modellrechnung wird $L_* = 1\,10^4\,\mathrm{L}_\odot$ angenommen. Die Effektivtemperatur des Sterns wird als $T_{\mathrm{eff}} = 2\,500\,\mathrm{K}$ angenommen. Typische Massenverlustraten, die bei Sternen mit Staubhüllen beobachtet werden, decken einen weiten Bereich ab. Dieser Parameter wird in den Modellrechnungen variiert (siehe später). Die Anfangsgeschwindigkeit v_0, um (5.2) zu integrieren, wird auf $1\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ festgelegt, was von der Ordnung der Schallgeschwindigkeit in der staubbildenden Schicht ist.

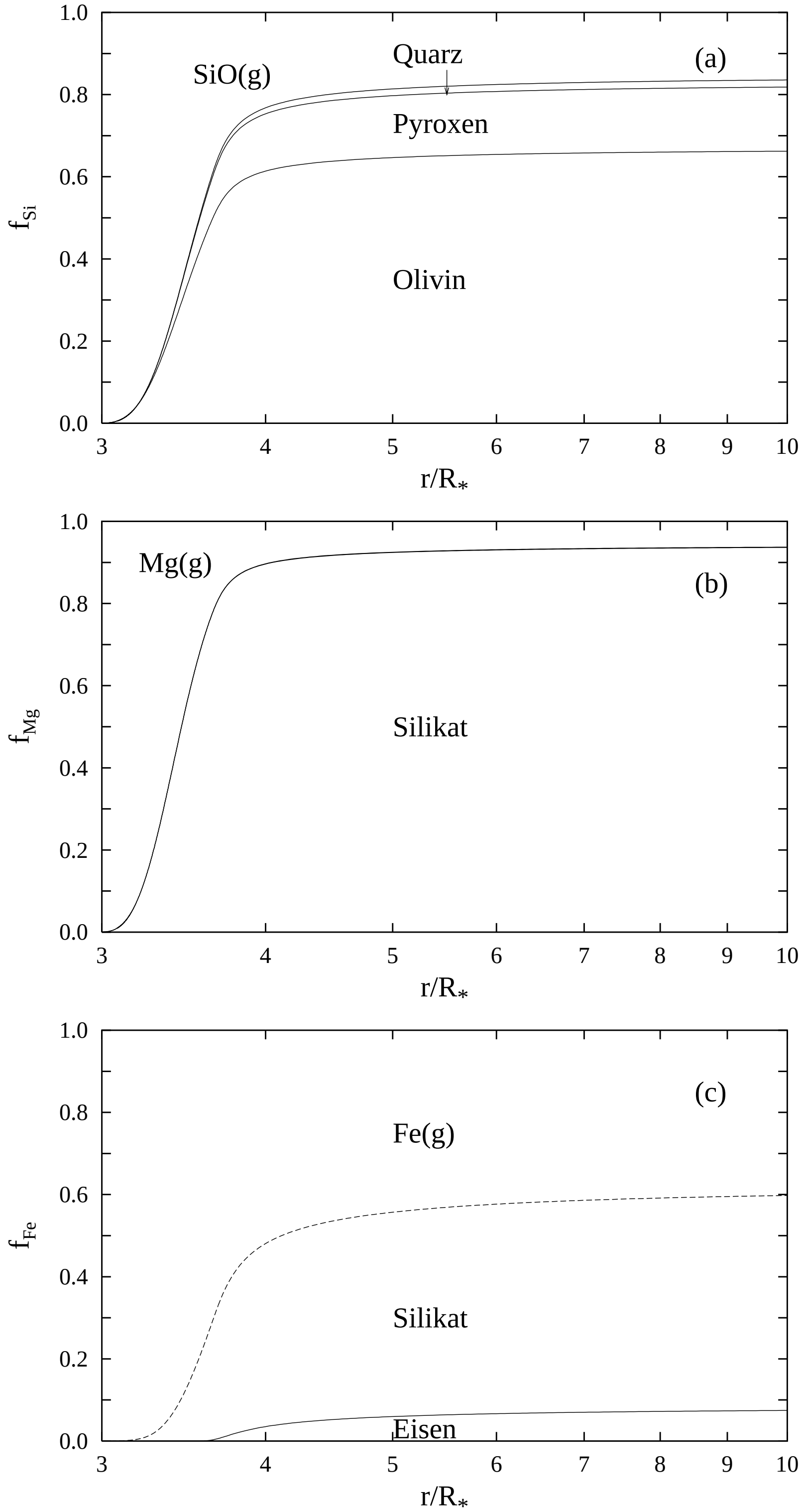

Abbildung 5.3 Verteilung von Si, Mg und Fe zwischen den festen Kondensaten und der Gasphase. Windmodell mit Standard Elementmischung und $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

5.4.2 Absorption durch Staub

Der flußgemittelte Massenabsorptionskoeffizient κ in (5.1) wird angenommen als

$$\kappa = \kappa_{\text{gas}} + \sum_i f_i \kappa_{i,\text{dust}} \,. \tag{5.5}$$

Die Opazitäten $\kappa_{i,\text{dust}}$ aller Staubarten i werden durch ihre mittleren Rosseland-Opazitäten genähert. Zusätzlich wird angenommen, dass sich die Opazitäten aller Spezies einfach addieren, was im Allgemeinen für das Rosseland-Mittel nicht zulässig ist, außer im Falle grauer Absorption. Da die Staubabsorption in dem Wellenlängenbereich, in dem die meiste stellare Energie emittiert wird (um $\approx 1.5\,\mu$m), nur wenig mit der Wellenlänge variiert, absorbiert der Staub nahezu grau und die Berechnung von κ durch einfaches Addieren der einzelnen Beiträge der verschiedenen Staubarten ist ausreichend genau.

Der Massenabsoptionskoeffizient $\kappa_{i,\text{dust}}$ der verschiedenen Staubbestandteile wird unter der Annahme berechnet, dass die am wenigsten häufigen Elemente, die zu ihrer Bildung benötigt werden, vollständig in diese Staubarten kondensieren (bei Silikatstaub ist dies normalerweise das Element Si). Da im Allgemeinen die Kondensation des Schlüsselelements in Staub nicht vollständig ist, muss der Absorptionskoeffizient $\kappa_{i,\text{dust}}$ mit dem Bruchteil f_i des Schlüsselelements multipliziert werden, der wirklich zu der Staubart i (siehe Gln. 5.5) kondensiert ist. Dieses f_i wird durch die Berechnung der Staubkondensation bestimmt.

Die Massenabsorptionskoeffizienten κ_i der unterschiedlichen Staubarten werden aus optischen Konstanten berechnet, wie in Gail [1998] beschrieben. Um die Absorption durch amorphes Pyroxen zu berechnen, werden für den komplexen Brechungsindex. Daten aus Henning & Mutschke [1997] für Pyroxen mit 30% Eisengehalt verwendet. Das Ergebnis für den Rosseland gemittelten Massenabsorptionskoeffizienten kann ziemlich genau durch die Gleichung (3.3) genähert werden.

5.4.3 Temperatur

Die Temperaturstruktur in der Staubhülle wird in der Näherung von Lucy [1971, 1976] berechnet (siehe Kapitel 3).

$$T^4(r) = \frac{1}{2} T_{\text{eff}}^4 \left[1 - \sqrt{1 - \frac{R_*^2}{r^2}} + \frac{3}{2}\tau_{\text{L}} \right] . \tag{5.6}$$

Die optische Tiefe τ_{L} wird durch

$$\frac{\mathrm{d}\tau_{\text{L}}}{\mathrm{d}r} = -\rho\kappa \frac{R_*^2}{r^2} \,. \tag{5.7}$$

bestimmt. κ ist das Rosseland-Mittel des durch (5.5) gegebenen Massenabsorptionskoeffizienten. Die Differentialgleichung für τ_{L} muss mit der Randbedingung

$$\lim_{r\to\infty} \tau_{\text{L}} = 0 \tag{5.8}$$

gelöst werden. Diese Näherung geht davon aus, dass zwischen der Gastemperatur und irgendeiner der inneren Gittertemperaturen der verschiedenen Staubarten kein Unterschied besteht.

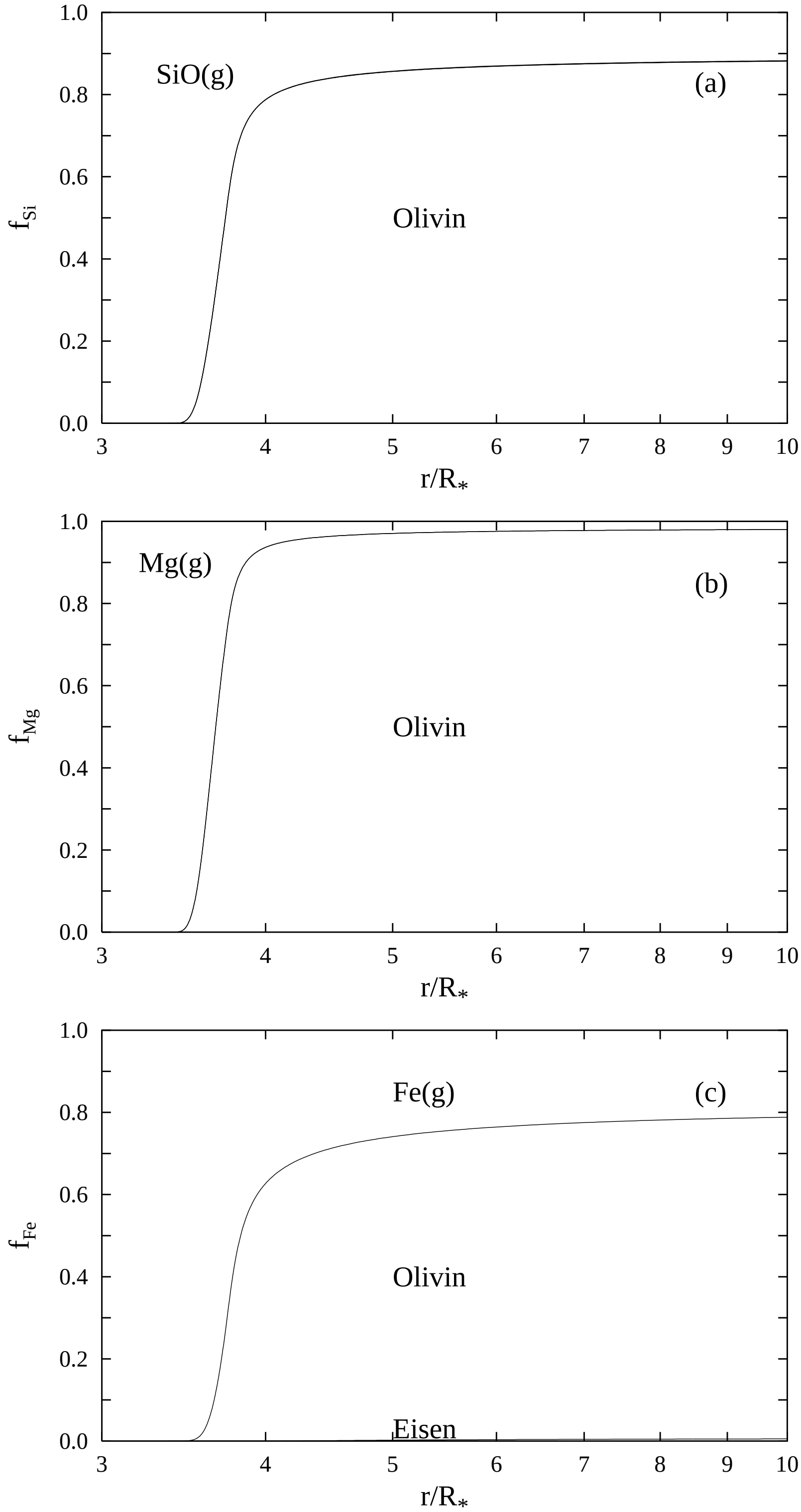

Abbildung 5.4 Verteilung von Si, Mg und Fe zwischen den festen Kondensaten und der Gasphase. Windmodell mit Standard Elementmischung und $\dot{M} = 3\,10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{a}^{-1}$.

5.5 Nukleation

Die Staubnukleation ist im Allgemeinen ein Zwei-Phasen-Prozess, der mit der Bildung winziger Keime (möglicherweise von der Größe der Ordnung einiger nm) beginnt, die als Zentren für das spätere Wachstum auf makroskopische Teilchen dienen. Die Materialien, aus denen sich die Keime bilden, können entweder aus dem selben Material wie die endgültigen Staubteilchen bestehen (homogene Staubbildung), oder die endgültigen Teilchen können sich durch das Wachstum irgendeines Materials auf Keimen anderer Zusammensetzung bilden (heterogene Staubbildung).

Laboruntersuchungen präsolarer Kohlenstoffteilchen aus Kohlenstoffsternen auf dem AGB zeigten, dass all diese Teilchen möglicherweise durch heterogenes Wachstum auf TiC- (oder ZrC-) Keimen entstanden (Bernatowicz et al. [1996]). TiC (ZrC) hat eine extrem hohe Gleichgewichtskondensationstemperatur (siehe Abb. (4.7) und kondensiert wahrscheinlich vor Kohlenstoff, da Kohlenstoffwachstum nur bei viel niedrigeren Temperaturen im Bereich von 900–1 000 K (Cherchneff [1998]) kinetisch möglich ist, ganz anders als Rechnungen im chemischen Gleichgewicht ($T_{\rm cond} \approx$ 1 600 K) voraussagen.

Die Situation hinsichtlich der Staubbildung in M-Sternen ist unklar. Laboruntersuchungen präsolarer Teilchen gleichen Typs, wie man sie aus Teilchen von C-Sternen erhält (Bernatowicz et al. [1996]), existieren nicht für Teilchen sauerstoffreicher AGB-Sterne. Es ist seit langer Zeit bekannt, dass homogene Silikatstaubbildung nicht möglich ist und die Bildung irgendeiner anderen Sorte von Keimen erfordert (Donn [1978]; Gail & Sedlmayr [1986]). Von Gail & Sedlmayr [1998a, 1998b] wird aus theoretischen Überlegungen vorgeschlagen, dass sich in diesem Fall zuerst TiO_2-Keime bilden, welche dann als Wachstumszentren für alle späteren Kondensate dienen. Die detailierte Berechnung der Eigenschaften von TiO_2-Clustern (Strukturen, Bindungsenergien, ...) und seine Anwendung auf die Nukleation in einem Sternwind durch Jeong [2000] haben gezeig, dass dieser Mechanismus in der Tat verantwortlich für Staubnukleation in M-Sternen sein kann. Die populäre Hypothese, dass Kondensation an Korund-Keimen stattfindet, ist unbegründet, da kleine Aluminiumcluster niedrige Bindungsenergien besitzen und sich nur bei sehr niedrigen Temperaturen bilden (Chang et al. [1998]).

Das Problem der Nukleation wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt, die sich auf den Wachstumsprozess von Staubteilchen konzentriert, die sich aus den häufigsten Elementen bilden. Es wird angenommen, dass all diese Teilchen an irgendwelchen Keimen wachsen, die sich bei einer Temperatur bilden, die über der oberen Grenztemperatur der Stabilität der häufigen Staubarten liegt. Die genaue Natur dieser Keime wird in dieser Rechnung nicht spezifiziert, aber es könnten TiO_2-Teilchen sein (Gail & Sedlmayr [1998b]; Jeong [2000]).

5.5.1 Stickingkoeffizient

Man findet in Messungen bei Verdampfungsexperimenten von Quarz sehr niedrige Stickingkoeffizienten. Sie werden alle aus Experimenten, die bei ziemlich hohen Temperaturen durchgeführt werden (z.B. Hashimoto [1990]), bestimmt und sind möglicherweise nicht auf SiO_2-Verdampfung unter zirkumstellaren Bedingungen anwendbar, bei denen die Temperaturen viel niedriger sind.

Vor kurzem wurden von Mendybaev et al. [1998] experimentelle Ergebnisse bei der SiO_2-Verdampfung bei viel niedrigeren Temperaturen in einer H_2-CO_2-Gasmischung vorgestellt. Die in ihrer Abb. 2 mit IW-3 gekennzeichneten Ergebnisse scheinen diejenigen zu sein, die auf Quarzverdampfung unter zirkumstellaren Bedingungen anwendbar sind, da diese Ergebnisse mit der Verdampfungsrate bei niedrigen Drucken ($p_{\mathrm{H_2O}} \to 0$) in ihrer Abb. 3 konsistent sind. Es wurde ein Sticking Koeffizient α für die Verdampfung von festem SiO_2 aus der Gleichung

$$\alpha = \frac{J_{\text{vapourisation,experimental}}}{p_{\text{SiO}}} \sqrt{2\pi k T m_{\text{SiO}}} \tag{5.9}$$

berechnet, in der p_{SiO} der Partialdruck des SiO-Moleküls im chemischen Gleichgewicht mit dem Festkörper ist. Dies geht von der Annahme aus, dass das Loslösen eines SiO-Moleküls von der Oberfläche die Verdampfungsrate bestimmt. Aus den drei Datenpunkten in Abb. 2 von Mendybaev et al. [1998] erhält man bei Temperaturen um 1 500 K Stickingkoeffizienten, die 0.2 leicht überschreiten. Durch Extrapolation auf 1 000 K erhält man einen Sickingkoeffizient von 0.07, das Extrapolationsverfahren ist jedoch sehr unsicher. Als einen Kompromiss wird in dieser Modellrechnung für Quarz ein Stickingkoeffizient von

$$\alpha_{\text{quartz}} = 0.1\,, \tag{5.10}$$

gewählt, der allerdings nur als grobe Schätzung angesehen werden kann.

5.5.2 Elementhäufigkeiten

Die Elementhäufigkeiten werden wie in Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993] gewählt, mit Ausnahme von He, C, N und O, für die AGB-Häufigkeiten gemäß Tab. 5.1 verwendet werden. Die Mg-Häufigkeit wird als freier Parameter betrachtet und wird in den Rechnungen variiert, um die Effekte verschiedener Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse zu untersuchen. Es wurde kein Versuch unternommen, Modelle mit anderen Metallizitäten zu rechnen.

5.6 Ergebnisse der Staubmodelle

5.6.1 Windmodell

Es wurde für einen Sternwind ein Satz an Modellen berechnet, indem die Gleichungssätze für den Sternwind und für Kondensation und Staubwachstum gleichzeitig gelöst wurden, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben. Es wurde mit der Integration nach außen an der Stabilitätsgrenze begonnen, an der die ersten Staubarten bei den höchsten Temperaturen zu kondensieren beginnen. In allen betrachteten Fällen ergab sich, dass Olivin die erste Staubart ist, die kondensiert. Die Rechnung folgt dann einem Gaselement auf seinem Weg auswärts. Der Anfangswert von τ_L, der zur Lösung von (5.7) benötigt wird, wurde durch ein mehrfaches Schießverfahren

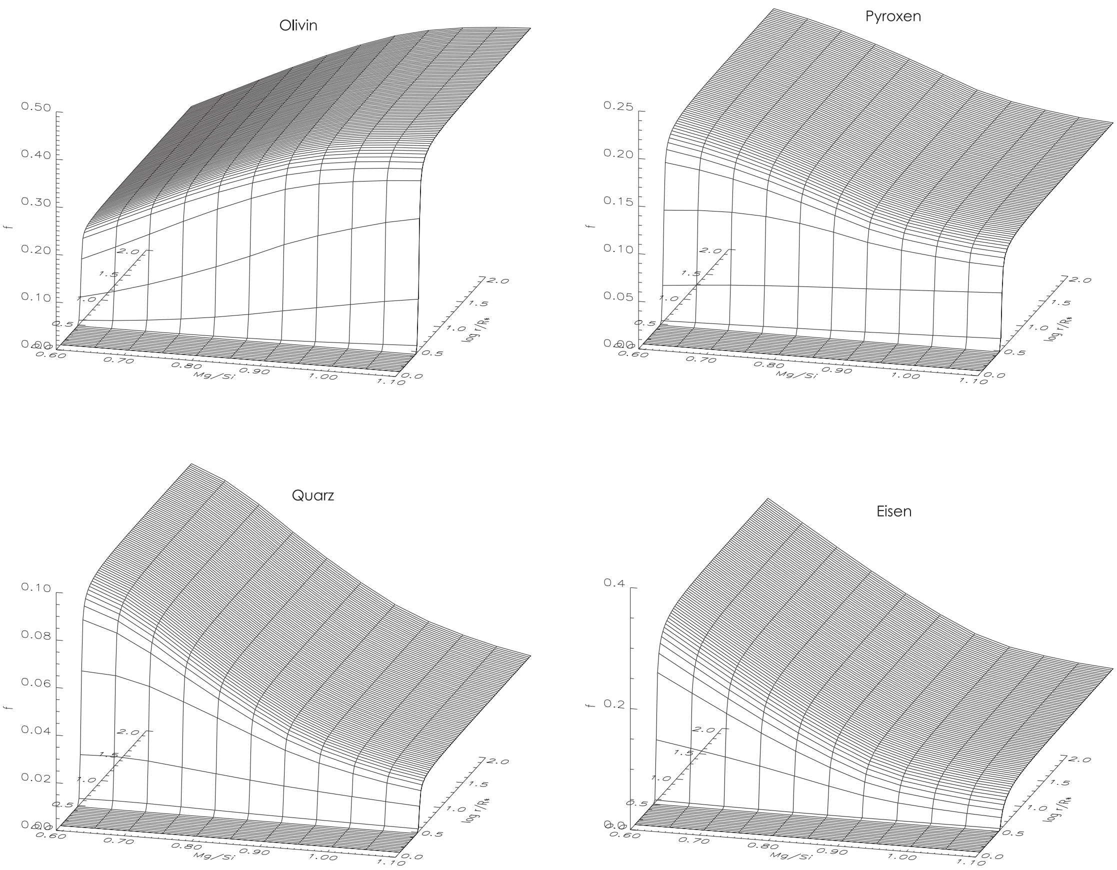

Abbildung 5.5 Radiale Variation des Kondensationsgrads f der häufigen Staubkomponenten für unterschiedliche Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse. Windmodell mit $\dot{M} = 10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

bestimmt, bis die Randbedingung (5.8) erfüllt war. Die Integrationen wurden mit einem Adams-Bashforth-Löser in dritter Ordnung genau durchgeführt (z.B. Golub & Ortega [1992]), der bei jedem Zeitschritt nur einmal die rechte Seite der Gleichungen bestimmen muss. Die Zeitschrittweite wurde dadurch festgelegt, dass sich die am stärksten verändernde Funktion bei jedem Zeitschritt nur um etwa 3% ändert.

Die Diffusionsgleichung für Eisenkationen in Olivin wird wie in Gail & Sedlmayr [1999] beschrieben gelöst.

5.6.2 Windmodell für die Standardelementmischung

Zunächst werden einige Ergebnisse eines Windmodells mit $\dot{M} = 10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ und mit Standardelementhäufigkeiten in M-Sternen auf dem AGB (siehe Abschnitt 5.2) vorgestellt, da die Einbeziehung von Pyroxen in die Berechnung der Nichtgleichgewichtselementmischung neu ist. Die Abbildung (5.3) zeigt den Kondensationsgrad der drei wichtigsten staubbildenden Elemente in M-Sternen.

Die Abbildung (5.3)a zeigt die Verteilung von Si zwischen der Gasphase und den drei Si enthaltenden Kondensaten, die in dieser Modellrechnung berücksichtigt werden: Olivin, Pyroxen und Quarz. Im Standardfall mit einem Magnesium-Silizium-Häufigkeitsverhältnis von $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} = 1.075$, ist die häufigste Si enthaltende Sorte in einem

Nichtgleichgewichtskondensationsmodell Olivin, während sich Pyroxen in weit geringeren Mengen bildet. Dies ist in scharfem Kontrast zu den Ergebnissen der Rechnungen im chemischen Gleichgewicht, bei denen für diese Elementmischung Pyroxen die dominierende kondensierte Staubart wäre. Der Grund für dieses unterschiedliche Kondensationsverhalten in einem Sternwind und im idealen Fall chemischen Gleichgewichts ist die Folge zweier Umstände:

1. Olivin ist das stabilere der zwei Substanzen und beginnt aus diesem Grund zuerst zu kondensieren.
2. Der Strahlungsdruck beschleunigt das Windmaterial schnell auf eine überschall-Ausströmungsgeschwindigkeit, sobald das erste stark absorbierende Material in solch einem Ausmaß kondensiert ist, dass Γ, definiert durch Gln. (5.1), Eins übertrifft (dies erfordert bei Silikaten einen Kondensationsgrad von der Ordnung von $f = 0.1$).

Da Olivin zuerst kondensiert, bleibt der Kondensationsgrad von Pyroxen etwas hinter dem von Olivin zurück, obwohl die Wachstumsbedingungen für beide Substanzen ähnlich sind. Die schnelle Beschleunigung des Winds nimmt rasch zu, sobald der Kondensationsgrad von Olivin die Grenze $f_{\mathrm{ol}} \approx 0.1$ überschreitet, und verdünnt das Windmaterial. Die Wachstumsbedingungen von Olivin und Pyroxen werden ungünstig, da aufgrund der schnell abnehmenden Stoßrate mit Wachstumsteilchen aus der Gasphase das Teilchenwachstum effektiv aufhört, bevor das kondensierbare Material aus der Gasphase aufgebraucht ist. Unter diesen Umständen ist die Pyroxenbildung stark unterdrückt. Ein bedeutender Teil des Siliziums bleibt als SiO-Molekül in der Gasphase zurück: in einem Windmodell mit der gegenwärtigen Parameterwahl nahezu 15% des Siliziums.

Ein kleiner Teil ($\approx$2% im gegenwärtigen Modell) kondensiert als Quarz. Im chemischen Gleichgewicht würde sich diese Substanz in einer Mischung mit dem Standard Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis nicht bilden, da sowohl Olivin als auch Pyroxen stabiler als Quarz sind und weil genügend Mg vorhanden ist, damit Si vollständig in diesen zwei Verbindungen kondensiert. Während des Kondensationsprozess im Nichtgleichgewicht in einem Sternwind beginnt allerdings Quarz bei einer nur wenig niedrigeren Temperatur als Olivin zu kondensieren da erst ein Teil der SiO Moleküle zur Bildung von Olivin und Pyroxen verbraucht sind. Da während der Frühphase der Kondensation und des Teilchenwachstumsprozesses ausreichend SiO-Moleküle aus der Gasphase verfügbar sind, wachsen alle Silikatverbindungen zunächst unabhängig voneinander, solange die Gasphase hinsichtlich der unterschiedlichen Kondensate stark übersättigt bleibt.

Würde sich das System in einen Zustand chemischen Gleichgewichts entwickeln, würde sich der Siliziumnachschub aus der Gasphase schlussendlich erschöpfen. Der Partialdruck von SiO in der Gasphase fällt unter den Sättigungsdruck der am wenigsten stabilen Sorte, in diesem Fall Quarz, und diese Sorte beginnt dann zu verdampfen, bei sie schließlich zugunsten der stabileren Verbindungen mit einem niedrigeren Sättigungsdruck von SiO in der Gasphase verschwindet. Auf diese Weise überleben nur die stabilsten Verbindungen, wenn sich das System dem Zustand chemischen Gleichgewichts nähert. Dies ist jedoch genau das, was in einem Sternwind nicht geschieht. Die Entwicklung zu einem chemischen Gleichgewichtszustand wird in einem

Sternwind durch die rasante Beschleunigung des staubigen Gases durch Strahlungsdruck und die folgende schnelle Verdünnung des Windmaterials unterdrückt. Dies friert einen frühen Übergangszustand ein, der irgendwann während des Kondensationsprozesses erreicht wurde, bevor die Wachstumsteilchen restlos verbraucht sind.

Aus diesem Grund kann sich im Sternwind eine kleine Menge Quarz bilden, und dies ist auch der Grund, warum Olivin und nicht Pyroxen die dominierende kondensierte Silikatart ist. Im Allgemeinen bedeuted dies, dass die Ergebnisse der Rechnungen im chemischen Gleichgewicht hinsichtlich der Existenz oder Nichtexistenz bestimmter Festkörper nicht zu buchstäblich genau zu nehmen sind, da die Staubmischung in zirkumstellaren Hüllen einen eingefrorenen Übergangszustand darstellt.

Die Abbildung (5.3)b zeigt die Verteilung von Mg zwischen der Gasphase und den drei Mg enthaltenden Kondensaten, die in dieser Modellrechnung berücksichtigt werden: Olivin, Pyroxen und Periklas (MgO). Gemäß Kondensationsrechnungen im Gleichgewicht bildet sich in der Standardelementmischung kein Periklas. In diesem Windmodell wird das meiste Magnesium bei der Bildung der Silikate aufgebraucht. In den Kondensationsrechnungen im Nichtgleichgewicht stellt sich heraus, dass sich Periklas in vollkommen vernachlässigbaren Mengen bildet. Der Grund ist, dass MgO nur bei einer Temperatur stabil wird, bei der bereits ein bedeutender Teil des Si in Silikaten kondensiert ist. Das Wachstum bedeutender Mengen an MgO wird dann durch die schnelle Verdünnung des Windmaterials verhindert.

Die Abbildung (5.3)c zeigt die Verteilung von Fe zwischen der Gasphase und den drei Fe enthaltenden Kondensaten, die in dieser Modellrechnung berücksichtigt werden: Olivin, Pyroxen und festes Eisen. Die Silikate brauchen nur einen Teil des Eisens auf, da eisenarme Silikate stabiler sind als eisenreiche Silikate. Der Eisengehalt der Nichtgleichgewichtskondensate übertrifft jedoch den Eisengehalt der Kondensate im Falle chemischen Gleichgewichts enorm. Festes Eisen bildet sich nur in geringen Mengen, da Eisen bei einer Temperatur zu kondensieren beginnt, bei der bereits bedeutende Mengen an Silikaten kondensiert sind. Wiederum verhindert die schnelle Verdünnung des Windmaterials eine effiziente Kondensation festen Eisens.

Die Abbildung (5.4) zeigt die Verteilung der Elemente zwischen der Gasphase und Festkörpern für ein Modell mit einer weit höheren Massenverlustrate von $\dot{M} = 3\,10^{-5}\,\mathrm{M_\odot\,a^{-1}}$. In diesem Fall bildet sich nur eine Staubart in bedeutenden Mengen, und dies ist Olivin. Aufgrund seiner frühen Bildung durch schnelles Teilchenwachstum im Wind mit hoher Dichte beschleunigt seine Bildung das Windmaterial durch Strahlungsdruck auf die Teilchen auf überschall-Ausströmungsgeschwindigkeiten, bevor irgendein anderes Material die Gelegenheit erhält, in bedeutenden Mengen zu kondensieren. Dies demonstriert, wie die frühzeitige Bildung einer häufigen Staubart die Kondensation weiterer Staubarten in einem Sternwind unterdrückt. Die Koexistenz bedeutender Mengen von mehr als einer Staubart scheint nur für eine nicht allzu hohe Massenverlustrate möglich zu sein, oder wenn ein häufiges erstes Kondensat nur ein ineffektiver Absorber stellarer Strahlung wäre.

5.6.3 Änderung der Staubzusammensetzung mit unterschiedlichen Mg/Si-Verhältnissen

Als nächstes wird die Abhängigkeit der Mineralmischung in der Staubhülle von dem Häufigkeitsverhältnis von Magnesium zu Silizium untersucht. Es werden vor allem Häufigkeitsverhältnisse im Bereich $0.6 \leq \epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \leq 1.5$ berücksichtigt, da dort die Mg/Si-Verhältnisse sind, die wahrscheinlich in AGB-Sternen vorliegen. In den Modellrechnungen wird die Si-Häufigkeit festgehalten und die Mg-Häufigkeit verändert, da Änderungen des Mg/Si-Verhältnisses hauptsächlich aufgrund der Streuung in der Mg-Häufigkeit vorkommen (siehe Edwardsson et al. [1993]). Die Abbildung (5.1) weist darauf hin, dass auch etwas höhere Häufigkeitsverhältnisse vorkommen können und für einen Stern ein Verhältnis von ewas mehr als zwei festgestellt wird. Doch man darf sich fragen, ob solch hohe Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisse realistisch sind. Die Abbildung (5.5) zeigt die Ergebnisse von Modellrechnungen von einem Satz von Windmodellen mit unterschiedlichen Mg/Si-Häufigkeitsverhältnissen und einer festen Massenverlustrate von $10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{a}^{-1}$. Für verschiedene Werte von $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}}$ werden die radiale Änderung des Kondensationsgrades der häufigsten Staubarten Olivin, Pyroxen, festes Eisen und Quarz gezeigt. Die relative Häufigkeit dieser Staubarten ist ziemlich verschieden von dem, was aus Gleichgewichtsrechnungen erwartet wird.

- Es bilden sich sogar für $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} < 1$ beträchtliche Mengen an Olivin, obwohl dieses Mineral nach den Ergebnissen von Abschnitt 5.3.3 nur in einem kleinen Temperaturintervall direkt unterhalb seiner Stabilitätsgrenze existieren sollte. Die hohe Olivinhäufigkeit ergibt sich aus dem oben diskutierten Effekt, dass Olivin als das stabilste Silikat das erste der Silikatminerale ist, das kondensiert, und dies das ausströmende Gas schnell beschleunigt, was das System daran hindert, in den Gleichgewichtszustand überzugehen. Für $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} < 1$ steigen mit sinkendem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis die Mengen an gebildetem Pyroxen. Pyroxen ist jedoch niemals die dominierende Magnesiumsilikatstaubart für $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} < 1$, wie Rechnungen im chemischen Gleichgewicht ergeben, da die frühzeitige Bildung von Olivin und die daraus folgende Windbeschleunigung durch Strahlungsdruck auf Olivin ein effizientes Pyroxenwachstum hemmt.

- Bei $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} < 1$ bildet sich Quarz als bedeutende Staubart, wie aus den Ergebnissen der Kondensation im chemischen Gleichgewicht zu erwarten ist. Es bildet sich jedoch nicht in solch großen Mengen, wie durch chemisches Gleichgewicht angedeutet. Der Grund ist wiederum die frühe Kondensation von Olivin, was die Effizienz der Kondensation weniger stabiler Staubarten reduziert. Die Ergebnisse belegen in jedem Fall, dass sich Quarz in solchen Mengen bildet, dass dieses Mineral in Objekten mit niedrigem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis eine messbare Staubart sein sollte. Dies wird in Abschnitt 5.7 gezeigt. Die Quarzkondensation verschwindet nicht bei $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} > 1$ wie in dem Fall chemischen Gleichgewichts, doch sind in diesem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnisbereich die Mengen an Quarz, die sich in Mg reichen Objekten bilden, sehr gering. Der Grund dafür, dass sich überhaupt Quarz bildet, ist der im vorigen Abschnitt diskutierte Nichtgleichgewichtseffekt.

- Es bilden sich beträchtliche Mengen an metallischem Eisen als eine separate Staubart in dieser Modellrechnung. Das meiste Eisen ist allerdings in Olivin

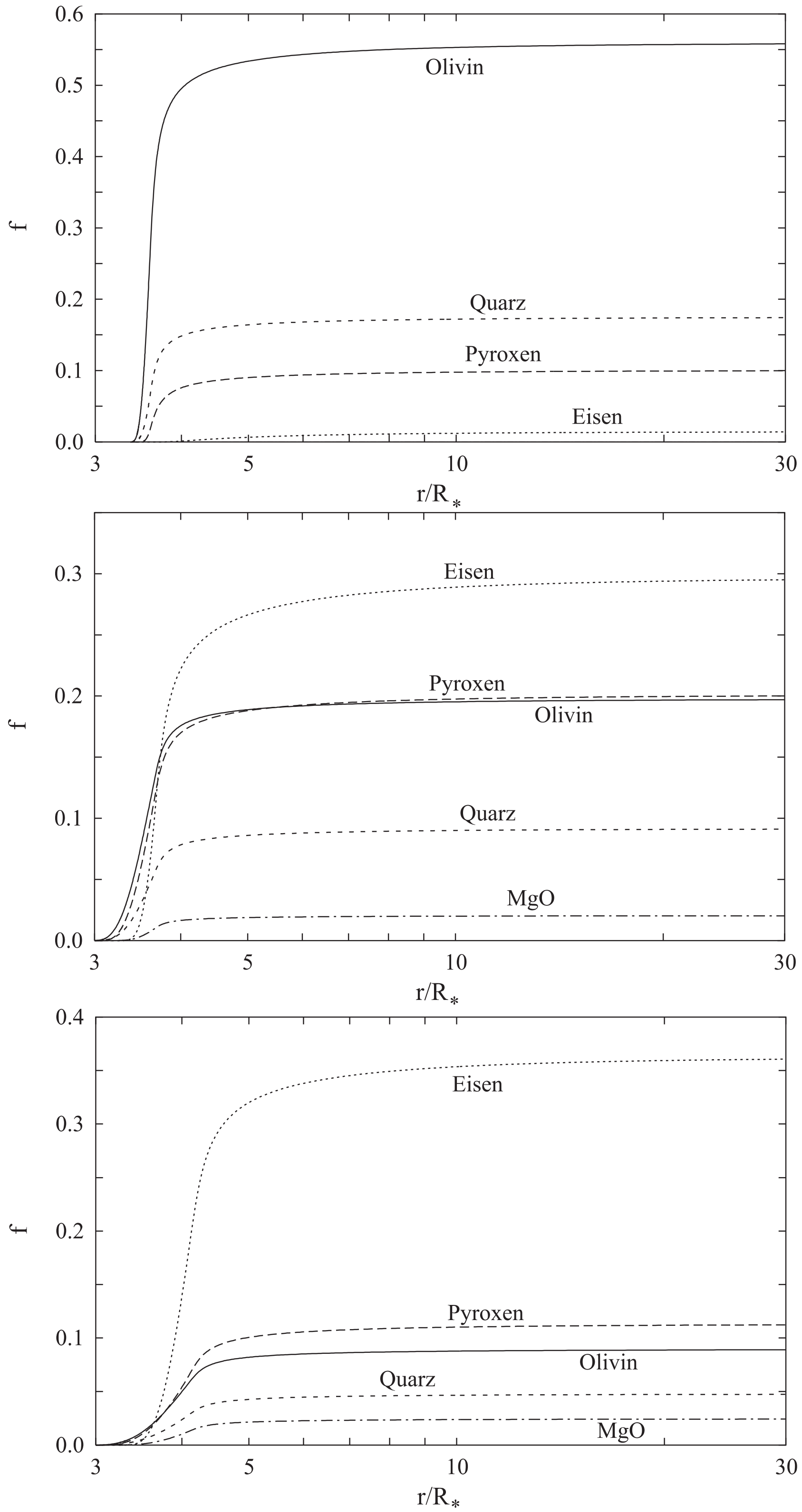

Abbildung 5.6 Radiale Variation des Kondensationsgrads f der häufigen Staubkomponenten für $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} = 0.6$ für unterschiedliche Massenverlustraten: $\dot{M} = 5\,10^{-6},\ 1\,10^{-5},\ 5\,10^{-5}\,\mathrm{M}_{\odot}\,\mathrm{a}^{-1}$ (von unten nach oben).

und Pyroxen gebunden. Nur bei den Modellen mit den niedrigsten Mg/Si-Häufigkeitsverhältnissen liegt mehr Eisen in Form von Eisenteilchen vor, als in Magnesium-Eisen-Silikaten gebunden ist. Der Anstieg des Kondensationsgrads von Eisen bei sinkendem $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si}$ ergibt sich aus den zurückgehenden Mengen an Olivin, dass sich bei sinkendem $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si}$ bildet, welches dann die Effizienz der Kondensation weniger stabiler Staubarten reduziert.

Die Abbildung (5.6) zeigt für Windmodelle mit drei verschiedenen Massenverlustraten die radiale Änderung des Kondensationsgrads f der unterschiedlichen Minerale bei einer magnesiumarmen Elementmischung mit $\epsilon_{\rm Mg}/\epsilon_{\rm Si} = 0.6$. Dieses Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis liegt am untersten Ende der Mg-Häufigkeiten, welche in Sternen mit Population I und II Metallizitäten auftreten können, und stellen den extremsten Fall dar, der bei Beobachtungen möglicherweise gefunden werden kann.

Das untere Bild in Abb. (5.6) zeigt die Mineralmischung für ein Windmodell mit $\dot{M} = 5\,10^{-6}\,{\rm M}_\odot\,{\rm a}^{-1}$. In diesem Modell führt die niedrige Dichte des ausströmenden Gases auf ein eher langsames Staubwachstum. Der Wind wurde dann noch nicht durch Strahlungsdruck auf Silikatteilchen stark beschleunigt, sobald das ausströmende Material den Temperaturbereich erreicht, bei dem Eisenkondensation möglich wird. Die für das Metallwachstum typische hohe Sticking Effizienz nahe Eins führt dann zu einem viel schnelleren Wachstum von Eisen als bei den anderen Mineralarten. Als Folge dessen hemmt der Strahlungsdruck auf den Eisenstaub und die daraus folgende starke Beschleunigung des Windmaterials dann das weitere Wachstum der anderen Staubarten.

Das mittlere Bild in Abb. (5.6) zeig die Mineralmischung für ein Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm a}^{-1}$. Es zeigt die auch in Abb. (5.5) gezeigte Mineralmischung auf eine andere Weise.

Das obere Bild in Abb. (5.6) zeigt die Mineralmischung für ein Windmodell mit $\dot{M} = 5\,10^{-5}\,{\rm M}_\odot\,{\rm a}^{-1}$. Die ziemlich günstigen Wachstumsbedingungen in einem Wind mit hohen Massenverlustraten begünstigen schnelles Teilchenwachstum und besonders das frühe Wachstum von Olivin. Das Olivin ist dann das häufigste Mineral, das sich zuerst bildet und ein effizientes Wachstum der weniger stabilen Minerale hemmt. Nichtsdestotrotz bilden sich Pyroxen und Quarz in nicht vernachlässigbaren Mengen. Die Bildung von Eisenteilchen ist jedoch aufgrund der niedrigeren Kondensationstemperatur von Eisen effizient unterdrückt. Erreicht das ausströmende Gas den Temperaturbereich, in dem Eisen stabil wird, hat die vorangegangene Bildung der anderen Staubarten den Wind in einem solchen Ausmaß beschleunigt, dass effizientes Staubwachstum nicht mehr möglich ist.

Diese Modellrechnungen zeigen, dass man bei einem bestimmten Teil der Riesensterne vom Spektraltyp M auf dem AGB, bei denen Magnesium weniger häufig ist als Silizium, erwarten kann, dass sich neben den beiden Standardstaubarten Olivin und Pyroxen auch Quarzteilchen bilden.

Die Ergebnisse für die relativen Mengen der unterschiedlichen Staubarten, die sich im Wind bilden, hängen zu einem großen Teil von den für die Sickingkoeffizienten akzeptierten numerischen Werten ab, welche nicht gut bekannt sind, mit Ausnahme vielleicht von Eisen (für reine Metalle hat man im Allgemeinen $\alpha = 1$). Besonders die

Suche nach experimentellen Ergebnissen für den Stickingkoeffizienten von Pyroxen war nicht erfolgreich, und aus diesem Grund wurde dieser als gleich mit dem von Olivin angenommen, was eventuell nicht zutreffend ist. Die relativen Mengen von Olivin und Pyroxen, die sich in einer realen Staubhülle bilden, mögen sich von denen, die sich in den Modellrechnungen ergeben haben, unterscheiden, wenn sich die beiden Sickingkoeffizienten stark voneinander unterscheiden. Das gleiche gilt hinsichtlich der relativen Mengen an Quarz und Silikaten, die sich im Wind bilden.

5.7 Infrarotspektren

Um die Möglichkeit zu untersuchen, Quarzteilchen in der Gegenwart anderer Staubarten durch ihre charakteristischen Absorptionsbanden in zirkumstellaren Spektren zu messen, wurden für die Windmodelle die IR-Emissionsspektren berechnet. Diese erhält man durch das Lösen der Strahlungstransportgleichung in einer kugelsymmetrischen Staubhülle mittels des p-z-Verfahrens und der Methode von Feautrier, wie bei Mihalas [1978] beschrieben. Die Temperaturverteilung wurde der Lösung des Windmodells entnommen. Dabei wird nicht die Möglichkeit berücksichtigt, dass die Temperaturen der unterschiedlichen Staubarten verschieden sein können. Dadurch wird bis zu einem gewissen Ausmaß die Genauigkeit der berechneten Spektren begrenzt. Es wurde nicht versucht, eine vollständig selbstkonsistente Lösung des Windmodells und des Problems des Strahlungstransports zu erhalten. Die Teilchenstreuung ist durch ein Fixpunkt-Iterationsverfahren einbezogen, und es wird für die Streustrahlung eine Winkelverteilung angenommen wie bei einer Dipolstreuung (Grenzfall kleiner Teilchen).

Die Strahlung des Zentralsterns wurde durch eine Schwarzkörperstrahlung der Temperatur $T_{\rm eff}$ genähert. An dem äußeren Rand der Hülle wurde die Einstrahlung der interstellaren Strahlung berücksichtig, die welche durch das Modell von Mathis, Metzger & Panagia [1983] gegeben ist.

Der innere Rand der Staubhülle wird durch die Kondensationsrechnung bestimmt und hängt von $T_{\rm eff}$ und bis zu einem gewissen Maß von $\dot{M}$ ab. Bei einem angenommenem $T_{\rm eff} = 2\,500\,\mathrm{K}$ liegt er bei etwa $3R_*$ (siehe Abb. (5.6)). Der äußere Rand wird immer bei $1\,000\,R_*$ angenommen.

Zur Berechnung der Absorption der Staubteilchen werden optische Konstanten für amorphe Silikatstaubteilchen verwendet (siehe Kapitel 3): (i) für glasiges Quarz von Brewster [1992] im kurzen und von Henning & Mutschke [1997] im langen Wellenlängenbereich, (ii) für amorphes Olivin von Dorschner et al. [1995], (iii) für amorphes Pyroxen von Henning & Mutschke [1997], (iv) für Eisen von Lide [1995] und Pollack et al. [1994]. Der in der Berechnung der jeweiligen Absorptions- und Streueffizienz Q_λ verwendete Teilchenradius ist derjenige, welcher sich aus dem Windmodell ergibt. Da sich die Teilchenradien mit dem Abstand vom Stern ändern, müssen die Absorptionseffizienzen für jeden Radius in der Staubhülle und an jedem in der Modellrechnung verwendeten Wellenlängengitterpunkt ($\approx 160 \times 390$) berechnet werden. Aus Gründen effizienterer Computerberechnungen werden diese in der Näherung kleiner Teilchen berechnet, welche im hier interessanten fernen IR-Wellenlängenbereich immer gültig ist.

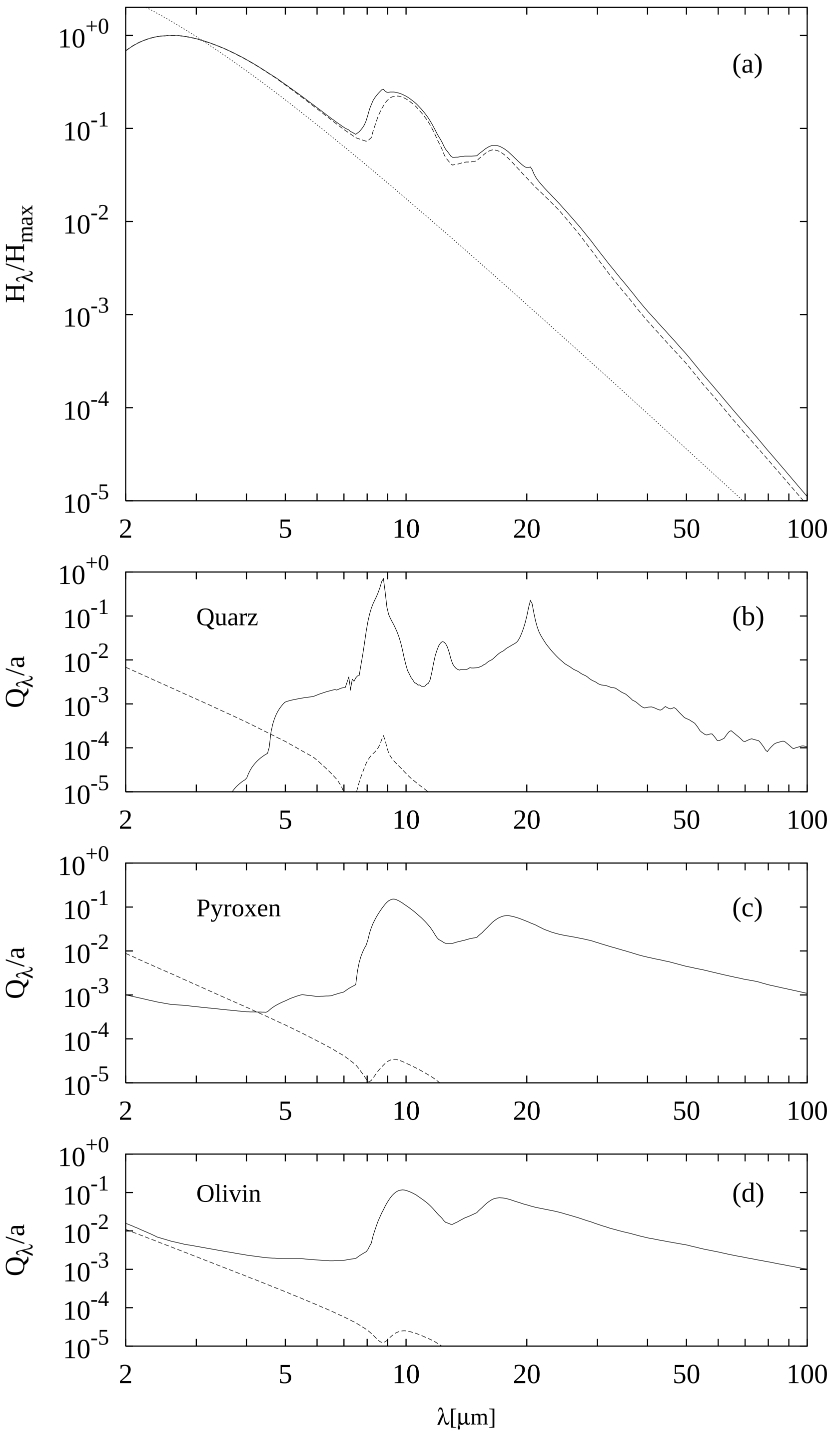

Abbildung 5.7 (a) Spektrale Energieverteilung der Emission einer Staubhülle für ein Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ für $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} = 0.8$. *durchgezogene Linie:* Spektrale Energieverteilung mit Quarz. *gestrichelte Linie:* Spektrale Energieverteilung ohne Quarz. *gepunktete Line:* Schwarzköperspektrum. (b) Q_λ/a für Absoption (durchgezogene Linie) und Streuung (gestrichelte Linie) von amorphem Quarz, (c) das gleiche für amorphes Pyroxen, und (d) für amorphes Olivin.

Die Abbildung (5.7)a zeigt die sich ergebende spektrale Energieverteilung der Staubhülle für ein Windmodell in dem Wellenlängenbereich $2 \leq \lambda \leq 100\,\mu$m, in dem eine Anzahl an Absorptionsbanden von Quarz existiert. Das Modell wird mit einem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis von 0.8 und einer Massenverlustrate von $1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ berechnet, bei dem erwartet wird, dass um die 7% des Si in Quarz kondensiert (siehe Abb. (5.5)). Bei dieser Massenverlustrate erscheinen die Staubabsorptionsbanden im Spektrum als Emissionsbanden. Die durchgezogene Linie entspricht der spektralen Energieverteilung der Staubhülle, alle Staubarten miteinbezogen. Die gestrichelte Linie ist die spektrale Energieverteilung, die man erhält, wenn die Absorption durch Quarz weggelassen wird. Die Abbildungen (5.7)b, (5.7)c und (5.7)d zeigen zum Vergleich die jeweilige Absorptions- und Streueffizienz Q_λ von Quarz-, Pyroxen- und und Olivinteilchen mit Radius $0.1\,\mu$m. Die Absorption durch Quarz erzeugt zwei spezifische Signaturen im Spektrum:

- Die kurze Wellenlängenschulter des $\lambda \approx 9.7\,\mu$m Silikatemissionsbandes ist durch die Verteilung des $\lambda \approx 8.7\,\mu$m Emmisionsbandes von Quarz bedeutend aufgeweitet und erhöht.
- Das $\lambda \approx 20.5\,\mu$m Emmisionsband von Quarz erzeugt bei dieser Wellenlänge einen kleinen Emmisions-Peak, der die lange Wellenlängenschulter des $\lambda \approx 18\,\mu$m Silikatemissionsbandes überlagert.

Zusätzlich ist der flache Übergang zwischen den ausgeprägten Silikatfeatures zu den kurzen Wellenlängen hin durch Quarzemission etwas aufgefüllt und erscheint flacher als ohne Quarz. Diese Modifikationen der spektralen Energieverteilung sollte in den beobachteten Spektren zirkumstellarer Staubhüllen beobachtbar sein, wenn Quarz vorhanden ist.

Die Abbildung (5.8) zeigt die spektralen Energieverteilungen eines $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot$ a^{-1} Modells für einen Satz unterschiedlicher Häufigkeitsverhältnisse $0.6 \leq \epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \leq 1.4$. Der Klarheit wegen sind die einzelnen Spektren um einen konstanten Faktor von zwei in vertikaler Richtung verschoben. Diese Abb. zeigt deutlich die Änderung der Stärke der Quarzfeatures mit dem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis und wie die Quarzfeatures bei $\epsilon_{\mathrm{Mg}}/\epsilon_{\mathrm{Si}} \gtrsim 1$ unsichtbar werden. Die Abnahme der Menge an gebildetem Olivinstaub bei sinkendem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis spiegelt sich in der steigenden Aufweitung der Spektren bei abnehmendem Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis wider.

In dieser Rechnung wurde nicht berücksichtigt, dass in vielen der Staubhüllen um AGB-Sterne ein gewisser Teil des Staubs in kristallinem Zustand vorliegt (z.B. Waters & Molster [1999]). Ist kristalliner Staub vorhanden, sind die Staubfeatures strukturierter und ausgeprägter als bei amorphem Staub. Es wurden für den ungünstigen Fall Spektren berechnet, dass die Staubfeatures ziemlich diffus sind, was in gewisser Weise der ungünstigste Fall ist, um Quarzfeatures zu finden.

Eine Untersuchung zahlreicher ISO-Spektren entwickelter Sterne (Molster [2000]) zeigt in einigen Fällen schwache Hinweise auf Emissionsfeatures, die mit Quarzstaub zusammenhängen könnten, besonders das Feature bei $20.67\,\mu$m. Auch die von Simpson [1991] vorgestellten Emmisionsbandprofile scheinen in einigen wenigen Fällen schwache Hinweise auf die Gegenwart von Quarz zu liefern. Dies weist darauf

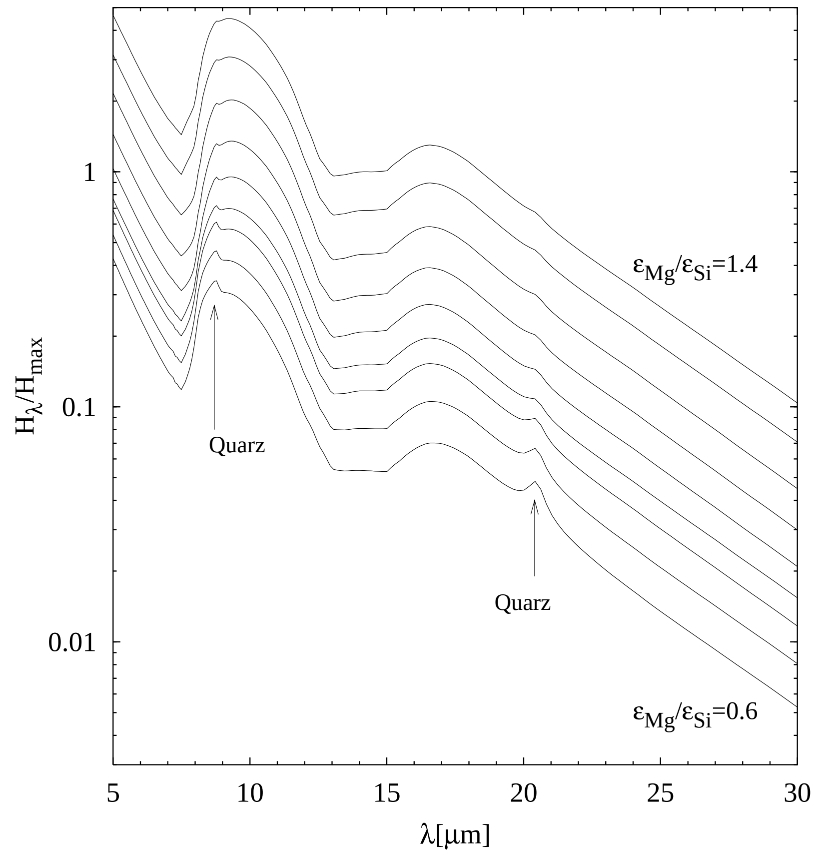

Abbildung 5.8 Spektrale Energieverteilung der Emission einer Staubhülle für unterschiedliche Mg/Si -Verhältnisse. Windmodell mit $\dot{M} = 1\,10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ und Mg/Si Verhältnisse zwischen 0.6 (unteres Spektrum) und 1.4 (oberstes Spektrum) in Schritten von 0.1.

hin, dass Quarz tatsächlich als Staubart in zirkumstellaren Hüllen weitentwickelter Sterne gefunden werden könnte. Ein endgültiger Schluß kann allerdings nur auf der Grundlage detailierter Modellrechnungen für die Emission aus der Staubhülle und der Analyse von ISO-Spektren möglicher Sternkandidaten gezogen werden. Aufgrund der Unsicherheiten bezüglich der Stickingkoeffizienten sollten solche Rechnungen besser durch konventionelle Strahlungstransportmodelle durchgeführt werden, bei denen die relativen Häufigkeiten der unterschiedlichen Staubarten durch Fitten beobachteter und synthetischer Spektren bestimmt werden.

5.8 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden die Folgen der Abweichungen von Stern zu Stern bezüglich des Mg/Si-Elementhäufigkeitsverhältnisses in der mineralischen Zusammensetzung der Staubmischung in Staubhüllen um AGB-Sterne untersucht. Für magnesiumarme Sterne mit $\epsilon_{\mathrm{Mg}} \lesssim \epsilon_{\mathrm{Si}}$ wird erwartet, dass Quarz als eine zusätzliche Staubkomponente gebildet wird, welche andererseits bei Sternen mit $\epsilon_{\mathrm{Mg}} > \epsilon_{\mathrm{Si}}$ nicht vorkommt. Es wurde gezeigt, dass die Bildung ausreichender Mengen Quarz in magnesiumarmen Sternen erwartet werden kann, sodass diese Staubkomponente durch charakteristische Spektraleigenschaften von Quarz in dem Infrarotspektrum der Staubhülle identifiziert werden kann.

Die beobachteten Elementhäufigkeiten galaktischer F- und G-Sterne legen nahe, dass in einem kleinen Teil in der Größe von 10 % aller Sterne mit Population I- und II-Metallizität die Magnesiumhäufigkeit geringer ist als die Siliziumhäufigkeit. Die Mehrheit von 90% aller Sterne haben eine die Siliziumhäufigkeit übersteigende Magnesiumhäufigkeit, wie es für die Sonne der Fall ist. Für viele dieser Sterne ist das Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis aber höher als das in der Häufigkeitstabelle von Anders & Grevesse [1989] gegebene.

Wenn sich solche Sterne später zum AGB entwickeln und dicke zirkumstellare Staubhüllen bilden, werden die magnesiumarmen Sterne wahrscheinlich Quarz-Staubteilchen und eine Mischung aus hauptsächlich Pyroxen- und einer kleineren Menge Olivin-Staubteilchen (sowie zusätzlich Eisen-Staubteilchen) bilden, während Sterne mit einer normalen Zusammensetzung ($\epsilon_{\rm Mg} > \epsilon_{\rm Si}$) Olivinteilchen und etwas geringere Mengen Pyroxenteilchen bilden werden, jedoch keine Quarzteilchen.

Die heutigen AGB-Sterne haben ihre Mg- und Si-Häufigkeiten von ihren Hauptreihen-Vorfahren geerbt. Damit sollte man erwarten, dass die heutigen AGB-Sterne die gleiche Art der Streuung von Mg/Si-Häufigkeitsverhältnissen zeigen wie die F- und G-Zwergensterne, da das durchschnittliche Mg/Si-Häufigkeitsverhältnis und der Grad der Streuung in den Mg/Si-Häufigkeiten völlig unabhängig von der Metallizität zu sein scheinen, außer für sehr niedrige Metallizitäten (Edwardsson et al. [1993]; Chen et al. [2000]). Die Staubhüllen von AGB-Sternen sollten dann eine variable Mischung von Olivin- und Pyroxen-Teilchen zeigen und in allen Fällen sollte zu einem kleinen Anteil Quarzstaub vorhanden sein.

Nur ein Stern aus der Auswahl an Sternen, die in Abb. (5.1) gezeigt werden, scheint eine Magnesiumhäufigkeit von etwa dem zweifachen der Siliziumhäufigkeit zu besitzen. In einer solchen Elementmischung erwartet man, dass sich MgO als eigene Staubart bilden kann. Dieses hohe Mg/Si-Verhältnis könnte ein Ergebnis der Fehler in den Häufigkeitsbestimmungen sein, doch wenn dieses hohe Verhältnis korrekt sein sollte, bedeuted das, dass einige Sterne mit MgO Staub existieren. In jedem Fall müssen solche Objekte jedoch selten sein.

Bei sehr metallarmen Sternen scheint Abb. (5.1) anzudeuten, dass im Allgemeinen Magnesium viel weniger häufig ist als Silizium. Dies würde bedeuten, dass sich bei den allerersten Generationen von AGB-Sternen mit sauerstoffreicher Chemie — vorausgesetzt, Staubkondensation ist in solchen Objekten möglich — nicht die Standardsilikatstaubteilchen bilden; es bilden sich hauptsächlich Quarzteilchen. Es wurden für diesen Fall keine Modellrechnungen durchgeführt, da dieses Modellprogramm auf staubgetriebene Winde zugeschnitten ist, doch bei sehr geringen Metallizitäten kann der Massenverlust nicht durch Staubkondensation getrieben werden.

Es sollte im Hinterkopf behalten werden, dass die quantitativen Ergebnisse der vorliegenden Modellrechnung für die relativen Häufigkeiten der unterschiedlichen Staubarten von den angenommenen Werten der Stickingkoeffizienten abhängen, welche im Allgemeinen schlecht bekannt sind. Eine bessere experimentelle Bestimmung dieser Größen ist dringend notwendig.

6. Kondensation von Magnesiumwüstit

6.1 Einführung

Die Elementmischung in den Sternwinden von AGB-Sternen ist entweder reich an Sauerstoff (M-Sterne) oder Kohlenstoff (C-Sterne) und hat in einigen wenigen Fällen beinahe gleiche Häufigkeiten von O und C (S-Sterne). Abhängig von dem Kohlenstoff - Sauerstoff -Häufigkeitsverhältnis sind die Staubmischungen, die sich im Sternwind kühler Riesensterne bilden, ganz unterschiedlich.

Es ist seit der ersten Entdeckung zirkumstellarer Staubhüllen Ende der 60er aus ihren Infrarotemissionen bekannt, dass bei Sternen mit sauerstoffreicher Elementmischung in ihrer Atmosphäre die dominierende Staubsorte in ihrem Sternwind ein amorphes Mg-Fe-Silikat ist. Das amorphe Mg-Fe-Silikat lässt sich durch seine beiden breiten featurelosen Emissions- oder Absorptionsbanden um etwa 9.7μm und 18μm identifizieren. Die Infrarotspektroskopie lieferte bereits in den späten 80ern erste Hinweise, dass die Staubzusammensetzung zirkumstellarer Hüllen um sauerstoffreiche Objekte komplexer ist. Es wurden Indizien für Strukturen in den Silikatbanden (Aitken et al. [1988]) und zusätzliche schwacher Emissionsbanden entdeckt, die auf die Existenz nicht-silikatischer Staubsorten hinweisen (Onaka et al.[1989]). Die drastisch verbesserte Auflösung in der IR-Spektroskopie und die Ausweitung der Spektroskopie auf das ferne IR durch den Satelliten ISO haben schließlich eine viel komplexere Staubzusammensetzung in sauerstoffreichen zirkumstellaren Hüllen aufgedeckt, als früher angenommen wurde (Waters et al. [1996]).

Ein reiche Ansammlung von Festkorperemissionsbanden im Spektralbereich $\lambda > 20\mu$m zeigt deutlich, dass bei vielen Objekten der Staub eine kristalline Struktur besitzt und aus einer Mischung aus Fe-armem Olivin und Orthopyroxen besteht (z.B. Molster et al. [2002a], [2002b], [2002c]). Eine der noch nicht eindeutig identifizierten Strukturen im Infrarotspektrum einiger Objekte ist ein ziemlich breites Emissionsfeature um etwa 20μm herum (Molster et al. [1999]). Es ist vorgeschlagen worden, dass dieses Feature zum Eisenoxid FeO gehört (Henning et al. [1995]; Posch et al. [2002]), da FeO oder sein Mischkristall mit MgO in genau dem richtigen Wellenlängenbereich ein breites Emissionsband hat, und weil Fe in ausreichender Menge vorhanden ist, damit sich genügend Oxidstaub bilden kann. Eisenoxide als

Bestandteil zirkumstellaren Staubs wurden auch von Rietmeijer [1992] vorgeschlagen. Henning et al. [1995] bestimmten die optischen Konstanten von Magnesiowüstit.

In dieser Kapitel wird unter theoretischen Gesichtspunkten die Kondensation der Oxide von Fe und Mg untersucht, sowie des Mischkristalls $Mg_xFe_{1-x-\delta}O$. Es werden zunachst einige Rechnungen im chemischen Gleichgewicht durchgeführt, um die Stabilitat von Fe- und Mg-Oxiden im Sternwind von AGB-Riesen und RGB- Überriesen mit sauerstoffreicher Elementmischung zu bestimmen. Die Rechnungen ergeben Magnesiowüstit als ein wahrscheinliches Kondensat. Dann wird für die Nicht-Gleichgewichtskondensation von Magnesiowüstit in einem kühlen Sternwind ein Modell entwickelt und ein Satz von Modellen berechnet, die zeigen, dass Magnesiowüstit auch bei der Kondensation unter Nichtgleichgewichtsbedingungen ein wahrscheinlicher Kandidat ist.

6.2 Kondensation von Fe–Mg Oxid

Zuerst werden die Mg- und Fe-Oxide im chemischen Gleichgewicht betrachtet. Die Kondensation von Festkörpern im ausströmenden Gas ist ein Nicht-Gleichgewichtsprozess, die chemische Untersuchung des Gleichgewichts ist aber geeignet, zu bestimmen, welche Kondensate in einer gegebenen Umgebung stabil sind. Das hilft, herauszufinden, welches der möglichen Kondensate in einer stellaren Ausströmung stabil sein kann und somit in der Berechnung als mögliches Staubmaterial in der Nicht-Gleichgewicht-Kondensation berücksichtigt werden muß.

6.2.1 Oxide von Mg und Fe

Magnesium bildet nur ein Oxid, MgO, welches bei hoher Temperatur stabil ist. Eisen bildet drei Oxide:

- Wüstit mit der chemischen Zusammensetzung $Fe_{1-\delta}O$.
- Hämatit mit der chemischen Zusammensetzung Fe_2O_3. Nur Fe^{3+}-Kationen bilden diese Verbindung.
- Magnetit mit der chemischen Zusammensetzung Fe_3O_4.

Daneben existieren zwei Mischkristalle zwischen Mg- und Fe-Oxiden:

- Die Mischungsreihen zwischen $Fe_{1-\delta}O$ und MgO, die so genannten Magnesiumwüstite.
- Die Mischungsreihen zwischen Fe_3O_4 ($=FeO{\cdot}Fe_2O_3$) und $MgFe_2O_4$ ($=MgO{\cdot}Fe_2O_3$).

Von diesen Mg- und Fe-Oxiden sind nur Hämatit und Magnetit in der kosmischen Standardelementmischung bei niedrigem Druck stabil. Ihre obere Satbilitätsgrenze wird bei eher geringeren Temperaturen (siehe Abb.(6.1)) erreicht und es ist unwahrscheinlich, dass sie sich in einer stellaren Ausströmung bilden, da sich bereits der

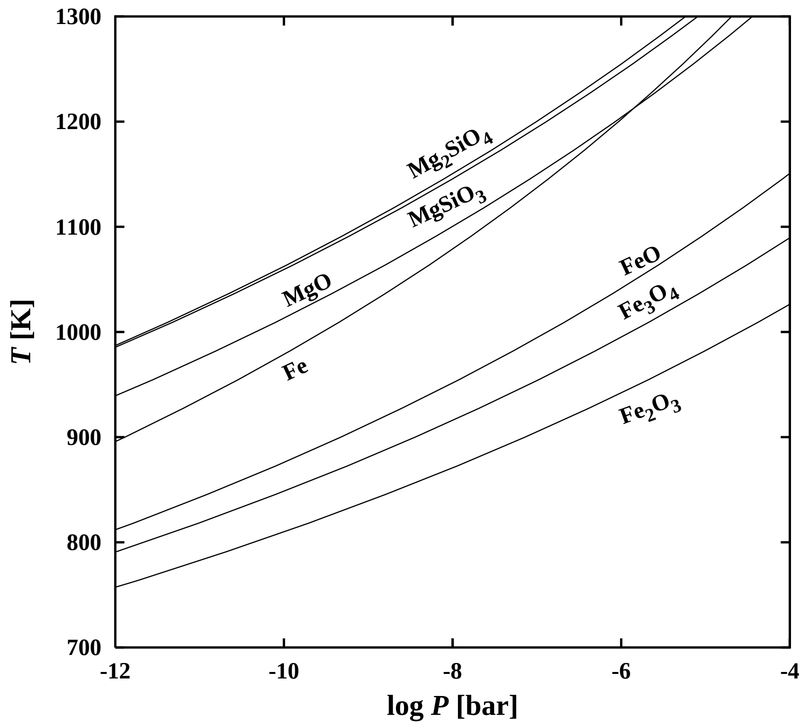

Abbildung 6.1 Stabilitätsgrenzen für die Mg und Fe Oxide für direkte Kondensation aus der Gasphase. In jeden Fall wird angenommen, dass keine Kondensate gleichzeitig auftreten.

Bildungsprozess von Magnesiumwüstit unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen als sehr ineffizient herausstellt, und da die Bedingungen zur Bildung von weiteren Staubteilchen unter Nicht-Gleichgewichtsbedingungen in einem Sternwind mit abnehmender Temperatur immer ungünstiger werden, wie im vorigen Kapitel diskutiert. Im chemischen Gleichgewicht aller Komponenten kommt das relativ stabile MgO nicht vor, weil das Mg vollständig durch die Bildung der stabileren Fe-Mg-Silikate aufgebracht wird. In einem stellaren Wind kommt der Prozeß der Staubbildung der Silikate gleichwohl nicht zur Vollendung, bis das Gas unter die Stabilitätsgrenze von MgO abgekühlt ist, sodass zu diesem Zeitpunkt noch ein erheblicher Teil des Mg in der Gasphase verbleibt und MgO bilden kann.

Es werden die einzelnen Stabilitätsgrenzen der reinen Mg- und Fe-Oxide für den Fall bestimmt, dass keine anderen Festkörper vorhanden sind. Dies entspricht beispielsweise dem Fall so schneller Abkühlung, dass nur unvollständige Kondensation stattfindet und eine gewisse Menge des kondensierenden Materials in der Gasphase verbleibt. Im chemischen Gleichgewicht wäre die Gasphase durch die Bildung der stabilsten Kondensate längst aufgebraucht. Die möglichen chemischen Reaktionen sind:

$$\mathrm{Mg} + \mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{MgO(s)} + \mathrm{H_2} \tag{6.1}$$
$$\mathrm{Fe} + \mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{FeO(s)} + \mathrm{H_2} \tag{6.2}$$
$$2\mathrm{Fe} + 3\mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{Fe_2O_3(s)} + 3\mathrm{H_2} \tag{6.3}$$
$$3\mathrm{Fe} + 4\mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{Fe_3O_4(s)} + 4\mathrm{H_2}\,. \tag{6.4}$$

Zum Vergleich wurde die Stabilitätsgrenze von Forsterit, Enstatit und festem Eisen im chemischen Gleichgewicht berechnet

$$2\mathrm{Mg} + \mathrm{Si} + 4\mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{Mg_2SiO_4(s)} + 4\mathrm{H_2O} \tag{6.5}$$
$$\mathrm{Mg} + \mathrm{Si} + 3\mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{MgSiO_3(s)} + 3\mathrm{H_2O} \tag{6.6}$$
$$\mathrm{Fe} \longrightarrow \mathrm{Fe(s)}\,. \tag{6.7}$$

Die Stabilitätsgrenzen wurden wie in Gail [1998a] berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. (6.1) zu sehen.

In dem für den Kondensationsbereich in zirkumstellaren Hüllen typischen Druckbereich um $P \approx 10^{-10}$ bar liegt die Stabilitätsgrenze von MgO bei einer etwas niedrigeren Temperatur als die Stabilitätsgrenzen der Silikate, allerdings nur um etwa 50 K niedriger, und sie liegt bei einer um etwa 30 K höheren Temperatur als die Stabilitätsgrenze von festem Eisen. Andererseits liegt die Stabilitätsgrenze von festem FeO bei einer um etwa 150 K niedrigeren Temperatur als die von MgO. Da sich das Staubwachstum im Sternwind über einen wesentlich weiteren Temperaturbereich als diesen erstreckt, ist der Wachstumprozeß der Silikate und von festem Eisen in einem schnell abkühlenden Wind noch nicht abgeschlossen, wenn das Gas zunächst unter die Stabilitätsgrenze von MgO und dann unter die Stabilitätsgrenze von FeO abgekühlt ist.

Dies zeigt: MgO-Kondensation wird kurz nach dem Beginn der Silikat-Kondensation und vor der Bildung von festem Eisen möglich und das MgO beginnt erhebliche Mengen Fe aufzunehmen, wenn die Temperatur unter die Stabilitätsgrenze von FeO fällt.

6.2.2 Das feste Magnesiumwüstit

Das Magnesiumwüstit kann als Mischkristall aufgefasst werden und besteht aus den Festkörpern FeO, Fe_2O_3 und MgO (Srečec et al. [1987]). Die Fe_2O_3 -Komponente ist für den kleinen Anteil der $Fe^{(3+)}$ Kationen im Magnesiumwüstitgitter verantwortlich.

6.2.3 Chemisches Gleichgewicht

Die Mischungskomponenten des Magnesiumwüstits können aus der Gasphase durch die folgende Reihe von Reaktionen gebildet werden:

$$\begin{aligned} \mathrm{Fe} + \mathrm{H_2O} &\rightarrow \mathrm{FeO(mw)} + \mathrm{H_2} \\ \mathrm{Mg} + \mathrm{H_2O} &\rightarrow \mathrm{MgO(mw)} + \mathrm{H_2} \\ 2\mathrm{Fe} + 3\mathrm{H_2O} &\rightarrow \mathrm{Fe_2O_3(mw)} + 3\mathrm{H_2} \end{aligned}$$

wobei 'mw' zeigt, dass der Festkörper als Bestandteil des Magnesiumwüstits gebildet wurde.

Keine dieser Mischungskomponenten würde im chemischen Gleichgewicht gebildet werden. In diese Fall würden Mg und Fe bei der Bildung von Silikaten und festem

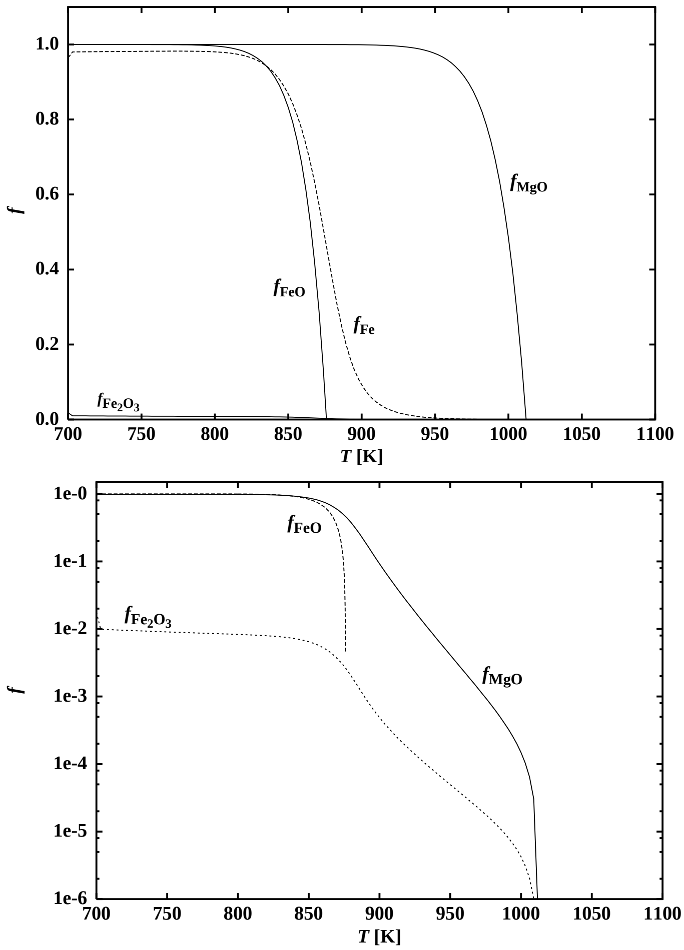

Abbildung 6.2 *Oben:* Kondensationsgrad f für Fe und Mg in Magnesiumwüstit für verschiedene Temperaturen und bei einem Druck von $P = 10^{-10}$ bar. f_{FeO} und $f_{\mathrm{Fe_2O_3}}$ sind die Fraktionen von den Element Fe, die in FeO und Fe_2O_3 kondensieren. f_{MgO} ist die Fraktion des Elements Mg in MgO. *Unten:* Logarithmische Darstellung, die den Gehalt an Fe_2O_3 im Festkörper deutlicher anzeigt.

Eisen ganz verbraucht sein. In diesem Kapitel wird das Problem der Bildung von Magnesiumwüstit aus der Gasphase im Fall, dass die Bildung von Silikaten und festem Eisen z.B. durch schnelle Kühlung verhindert sind, betrachtet. Magnesiumwüstit befinde sich also in chemischen Gleichgewicht mit der Gasphase. Die thermodynamischen Gleichgewichtsbedingungen für die Bildung der festen Mischungskomponenten sind nach der Gleichgewichtsbedingung (4.8)

$$\mu(\mathrm{H_2O}) + \mu(\mathrm{Fe}) = \mu(\mathrm{FeO}, \mathrm{mw}) + \mu(\mathrm{H_2}) \tag{6.8}$$

$$\mu(\mathrm{H_2O}) + \mu(\mathrm{Mg}) = \mu(\mathrm{MgO}, \mathrm{mw}) + \mu(\mathrm{H_2}) \tag{6.9}$$

$$3\mu(\mathrm{H_2O}) + 2\mu(\mathrm{Fe}) = \mu(\mathrm{Fe_2O_3}, \mathrm{mw}) + 3\mu(\mathrm{H_2})\,. \tag{6.10}$$

Das chemische Potential μ der einzelnen Spezies bei der Bildung von Magnesiumwüstit sind für die Gasphase durch

$$
\begin{aligned}
\mu(\mathrm{H_2O}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{H_2O}} + RT\ln\frac{p_{\mathrm{H_2O}}}{p_0} && (6.11)\\
\mu(\mathrm{H_2}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{H_2}} + RT\ln\frac{p_{\mathrm{H_2}}}{p_0} && (6.12)\\
\mu(\mathrm{Fe}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{Fe}} + RT\ln\frac{p_{\mathrm{Fe}}}{p_0} && (6.13)\\
\mu(\mathrm{Mg}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{Mg}} + RT\ln\frac{p_{\mathrm{Mg}}}{p_0} && (6.14)
\end{aligned}
$$

gegeben (Atkins [1994]). p_0 ist der Standarddruck (=1 bar). Für die festen Spezies sind die chemischen Potentiale durch

$$
\begin{aligned}
\mu(\mathrm{FeO}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{FeO}} + RT\ln x_{\mathrm{FeO}} + RT\ln\gamma_{\mathrm{FeO}} && (6.15)\\
\mu(\mathrm{MgO}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{MgO}} + RT\ln x_{\mathrm{MgO}} + RT\ln\gamma_{\mathrm{MgO}} && (6.16)\\
\mu(\mathrm{Fe_2O_3}) &= \Delta G(T)_{\mathrm{Fe_2O_3}} + RT\ln x_{\mathrm{Fe_2O_3}} \\
&\quad + RT\ln\gamma_{\mathrm{Fe_2O_3}} && (6.17)
\end{aligned}
$$

gegeben (Atkins [1994]). Die x's sind die Konzentrationen der Mischungskomponenten und die γ's sind die entsprechenden Aktivitätskoeffizienten in der Mischung. Sie beschreiben die Abweichung vom Fall der idealen Mischung. Die ΔG's sind die Änderungen der freien Enthalpie bei der Bildung aus den Elementen im Referenzzustand.

Einsetzen der Gleichungen (6.11) ... (6.17) in die thermodynamischen Gleichgewichtsbedingungen (6.8) ... (6.10) ergibt

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\Delta G_1/RT} &= \frac{p_{\mathrm{H_2}} x_{\mathrm{FeO}} \gamma_{\mathrm{FeO}}}{p_{\mathrm{Fe}} p_{\mathrm{H_2O}}} && (6.18)\\
\mathrm{e}^{\Delta G_2/RT} &= \frac{p_{\mathrm{H_2}} x_{\mathrm{MgO}} \gamma_{\mathrm{MgO}}}{p_{\mathrm{Mg}} p_{\mathrm{H_2O}}} && (6.19)\\
\mathrm{e}^{\Delta G_3/RT} &= \frac{p^3_{\mathrm{H_2}} x_{\mathrm{Fe_2O_3}} \gamma_{\mathrm{Fe_2O_3}}}{p^2_{\mathrm{Fe}} p^3_{\mathrm{H_2O}}} && (6.20)
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
\Delta G_1 &= \Delta G_{\mathrm{H_2O}} - \Delta G_{\mathrm{FeO(s)}} - \Delta G_{\mathrm{H_2}} && (6.21)\\
\Delta G_2 &= \Delta G_{\mathrm{H_2O}} - \Delta G_{\mathrm{MgO(s)}} - \Delta G_{\mathrm{H_2}} && (6.22)\\
\Delta G_3 &= 3\Delta G_{\mathrm{H_2O}} + 2\Delta G_{\mathrm{Fe}} - \Delta G_{\mathrm{Fe_2O_3(s)}} - 3\Delta G_{\mathrm{H_2}}\,. && (6.23)
\end{aligned}
$$

Die Konzentrationen x_{FeO}, x_{MgO} and $x_{\mathrm{Fe_2O_3}}$ der Mischungskomponenten unterliegen der Bedingung

$$
x_{\mathrm{FeO}} + x_{\mathrm{Fe_2O_3}} + x_{\mathrm{MgO}} = 1\,. \tag{6.24}
$$

Die Aktivitätskoeffizienten der Mischungskomponenten von Magnesiumwüstit wurden beim Standarddruck p_0 und im Temperaturbereich zwischen 1050 und 1400 K durch Srečec et al. [1987] bestimmt. Durch anpassen der Margules Gleichungen (z.B.

Philpotts [1990]) an ihre experimentellen Ergebnisse haben sie

$$\begin{aligned}
\ln \gamma_{\mathrm{FeO}} &= \left(\frac{521}{T} + 5.062\right) x^2_{\mathrm{Fe_2O_3}} + \\
&\quad \left(-\frac{719}{T} + 3.041\right) x_{\mathrm{Fe_2O_3}} x_{\mathrm{MgO}} + \\
&\quad \left(\frac{525}{T} + 0.480\right) x^2_{\mathrm{MgO}} \qquad (6.25) \\
\ln \gamma_{\mathrm{Fe_2O_3}} &= \left(\frac{781}{T} - 0.480\right) x^2_{\mathrm{FeO}} + \\
&\quad \left(\frac{698}{T} + 2.582\right) x_{\mathrm{FeO}} x_{\mathrm{MgO}} + \\
&\quad \left(\frac{1209}{T} + 2.262\right) x^2_{\mathrm{MgO}} \qquad (6.26) \\
\ln \gamma_{\mathrm{MgO}} &= \left(\frac{386}{T} + 0.593\right) x^2_{\mathrm{FeO}} + \\
&\quad \left(\frac{6211}{T} - 3.587\right) x_{\mathrm{Fe_2O_3}} x_{\mathrm{FeO}} + \\
&\quad \left(-\frac{33630}{T} + 36.210\right) x^2_{\mathrm{Fe_2O_3}} \qquad (6.27)
\end{aligned}$$

gefunden. Wendet man dies auf die Bildung von Magnesiumwüstit in zirkumstellaren Hüllen an, ist es notwendig die Aktivitätskoeffizienten γ in einem Temperaturbereich anzuwenden, der weit außerhalb des Bereichs der Labormessung liegt (siehe Abb. (6.1)).

6.2.4 Elementhäufigkeit

Zusätzlich zu den Gleichungen für das chemische Gleichgewicht hat man die Gleichungen für die Häufigkeiten der Elemente, die an der Bildung der Mischungskomponenten in Magnesiowüstit beteiligt sind. Bei vorliegendem Problem genügt es anzunehmen, dass bei den interessierenden niedrigen Temperaturen der gesamte Wasserstoff in H_2-Molekülen gebunden vorliegt. In diesem Fall ist der fiktive Partialdruck P_{H} aller Wasserstoffkerne gegeben durch

$$P_{\mathrm{H}} = \frac{2P}{1 + 2\epsilon_{\mathrm{He}}} \,. \qquad (6.28)$$

P ist der Gesamtdruck und ϵ_{He} die Elementhäufigkeit von He (nach Teilchenzahl) relativ zu H. Der Partialdruck von H_2 ist

$$p_{\mathrm{H_2}} = \frac{1}{2} P_{\mathrm{H}} \,. \qquad (6.29)$$

Weiter kann man sicher annehmen, dass der gesamte Kohlenstoff in CO gebunden ist, und dem durch Abziehen der Kohlenstoffhäufigkeit von der Sauerstoffhäufigkeit Rechnung tragen.

Es wird ein Kondensationsgrad f_{mw} von Material aus der Gasphase in Magnesiowüstit definiert durch den Anteil von Sauerstoffkernen, der in

$$Mg_{x_{\mathrm{MgO}}} \mathrm{Fe}_{(x_{\mathrm{FeO}} + x_{\mathrm{Fe_2O_3}})} \mathrm{O} \qquad (6.30)$$

kondensiert ist. Dann entfallen auf jedes O-Atom in Magnesiowüstit x_{MgO} Mg-Atome, die in der Mischungskomponente MgO gebunden sind, x_{FeO} in der Mischungskomponente FeO gebundene Fe-Atome und $x_{\mathrm{Fe_2O_3}}$ in der Mischungskomponente Fe_2O_3 gebundene Fe-Atome. Der Partialdruck freier Fe-Atome in der Gasphase ist dann gegeben durch

$$p_{\mathrm{Fe}} = \epsilon_{\mathrm{Fe}} P_{\mathrm{H}} - \epsilon_{\mathrm{O}} f_{\mathrm{mw}} P_{\mathrm{H}} (x_{\mathrm{FeO}} + x_{\mathrm{Fe_2O_3}})\,, \tag{6.31}$$

der Partialdruck freier Mg-Atome durch

$$p_{\mathrm{Mg}} = \epsilon_{\mathrm{Mg}} P_{\mathrm{H}} - \epsilon_{\mathrm{O}} f_{\mathrm{mw}} P_{\mathrm{H}} x_{\mathrm{MgO}}\,, \tag{6.32}$$

und der Partialdruck freier Wassermoleküle durch

$$p_{\mathrm{H_2O}} = \epsilon_{\mathrm{O}} P_{\mathrm{H}} - \epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} - \epsilon_{\mathrm{O}} f_{\mathrm{mw}} P_{\mathrm{H}}\,. \tag{6.33}$$

6.2.5 Ergebnisse

Der Gleichungssatz (6.18) ... (6.20) und (6.31) ... (6.33) und die Bedingung (6.24) bilden ein System von sieben Gleichungen für die sieben Unbekannten x_{MgO}, x_{FeO}, $x_{\mathrm{Fe_2O_3}}$, f_{mw} und p_{Mg}, p_{Fe}, $p_{\mathrm{H_2O}}$. Der Druck $p_{\mathrm{H_2}}$ ist durch (6.29) gegeben. Die jeweilige freie Enthalpie der Gasspezies und der Mischungskomponenten sind aus Sharp & Huebner [1990] entnommen. Das nichtlineare Gleichungssystem wurde durch eine Newton-Raphson-Iteration gelöst.

Der obere Teil von Abb. (6.2) zeigt für einen Gesamtdruck von $P = 10^{-10}$ bar, der typisch für die Kondensationszone in zirkumstellaren Hüllen ist, die Variationen der Anteile von f_{MgO}, f_{FeO} und $f_{\mathrm{Fe_2O_3}}$ der Elemente Mg und Fe die in den Mischungskomponenten MgO, FeO und Fe_2O_3 von Magnesiumwüstit kondensiert sind. Diese hängen mit den Konzentrationen über

$$\begin{aligned} f_{\mathrm{MgO}} &= \frac{x_{\mathrm{MgO}} f_{\mathrm{mw}} \epsilon_{\mathrm{O}}}{\epsilon_{\mathrm{Mg}}} && (6.34)\\ f_{\mathrm{FeO}} &= \frac{x_{\mathrm{FeO}} f_{\mathrm{mw}} \epsilon_{\mathrm{O}}}{\epsilon_{\mathrm{Fe}}} && (6.35)\\ f_{\mathrm{Fe_2O_3}} &= \frac{x_{\mathrm{Fe_2O_3}} f_{\mathrm{mw}} \epsilon_{\mathrm{O}}}{\epsilon_{\mathrm{Fe}}} && (6.36) \end{aligned}$$

zusammen. Die Abbildung zeigt zum Vergleich den Anteil an in festem Eisen kondensiertem Fe als gestrichelte Linie, wenn nur Eisen aus der Gasphase kondensieren würde und keine anderen Festkörper.

Der untere Teil von Abb. (6.2) zeigt für den gleichen Druck P die Anteile f_{MgO}, f_{FeO}, und $f_{\mathrm{Fe_2O_3}}$ in einem Graphen mit logarithmischer Skala, um deutlicher den Anteil an Fe_2O_3 zu zeigen, der in Magnesiowüstit enthalten ist.

6.3 Diffusion in Wüstit

Die Kondensation von Magnesiowüstit im chemischen Gleichgewicht beginnt an der Stabilitätsgrenze von reinem MgO als praktisch reine MgO-Teilchen. Nur wenn die

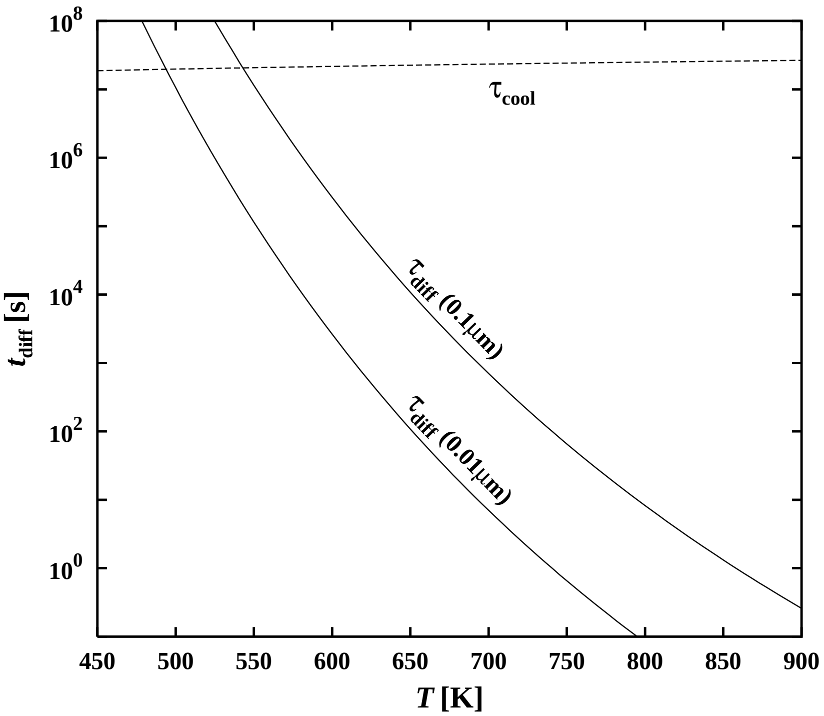

Abbildung 6.3 Charakteristische Zeitskala $\tau_{\rm diff}$ für die Homogenisierung von Unterschieden in der Zusammensetzung von Magnesiumwüstitteilchen mit Radius $a = 0.1\,\mu$m und 0.01 μm. $\tau_{\rm cool}$ (gepunktete Linie) ist die charakteristische Zeitskala für die Kühlung des ausströmenden Gasses.

Temperatur bis nahe der Stabilitätsgrenze von FeO gefallen ist, kann sich ein Mischkristall mit bedeutendem Fe-Gehalt bilden. Dies wirft folgende Frage auf: Wenn ein Teilchen in einer stellaren Ausströmung erst als Magnesiumoxidteilchen wächst und später dazu neigt, zusätzliche Schichten Magnesiowüstit anzulagern, was geschieht mit dem MgO-Kern? Er kann sich mit den äußeren Schichten nur durch Diffusion von Mg^{2+} und Fe^{2+} Kationen durch das Gitter ins Gleichgewicht bringen. Ist die Diffusionszeitskala der Kationen über ein Teilchen kurz im Vergleich zu der charakteristischen Zeitskala des Teilchenwachstums, dann ist die Teilchenzusammensetzung homogen. Auch der ursprüngliche MgO-Kern passt später seine Zusammensetzung durch Kationdiffusion jener der äußeren Magnesiowüstitschichten an. Im umgekehrten Fall entwickeln die Teilchen eine Kern-Mantel-Struktur mit einem reinen MgO-Kern und einem Magnesiowüstitmantel. Die Suche nach experimentellen Werten für die Kationdiffusion in Magnesiowüstit war nicht erfolgreich. Die Diffusion in reinem Wüstit wurde jedoch experimentell bestimmt. Rickert & Weppner [1974] maßen Kationdiffusion in Wüstit der Zusammensetzung $Fe_{1-\delta}$ im Bereich von $\delta = 0.060 \ldots\ 0.15$ und bei Temperaturen zwischen 900°C und 1100°C. Entsprechend der vorherigen Ergebnisse für die Zusammensetzung von Wüstit unter zirkumstellaren Bedingungen ist eine Defektkonzentration von $\delta = 0.01$ repräsentativ für jene von Wüstit in der sauerstoffreichen Umgebung einer zirkumstellaren Staubhülle (siehe Abb. (6.2)). Die Ergebnisse von Rickert & Weppner [1974] wurden auf $\delta = 0.01$ extrapoliert, was folgenden temperaturabhängigen Kationdiffusionskoeffizienten ergibt:

$$D = 4 \times 10^2\, \mathrm{e}^{-24900/T}\,. \tag{6.37}$$

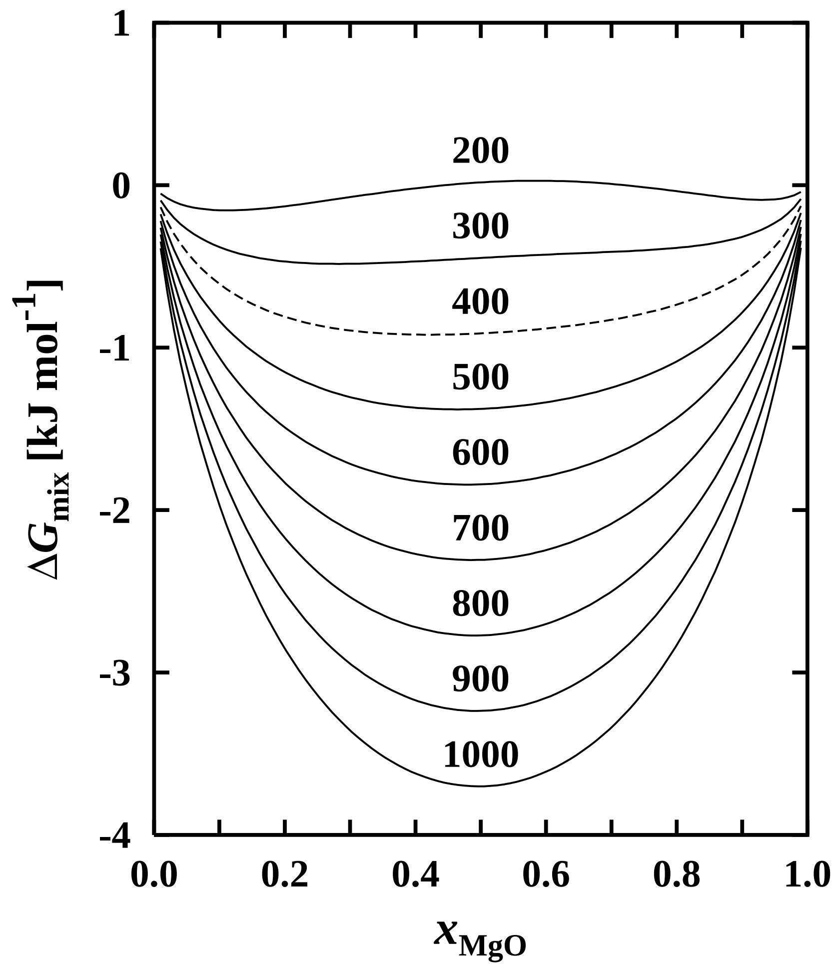

Abbildung 6.4 Variation der freien Mischungsenthalphie $\Delta G_{\text{mix}}(x, T)$ für FeO und MgO mit der Molenfraktion x_{MgO} in Mischkristall für verschiedene Temperaturen. Bei $T \lesssim 400\,\text{K}$ (gepunktete Linie) beginnt der Graph der Mischungsenthalphie eine nach unten offene Parabel zu beschrieben. Für diese Temperaturen ist Magnesiumwüstit instabil.

Aufgrund sehr ähnlicher Ionenradien von Mg^{2+} und Fe^{2+} und änhlicher Gitterkonstanten von MgO und FeO (Lide [1995]) wird dieser Kationdiffusionskoeffizient auch für Magnesiowüstit verwendet.

Die charakteristische Zeitskala für Diffusion über ein Staubteilchen der Größe a ist

$$t_{\text{diff}} = \frac{a^2}{D} \,. \tag{6.38}$$

Dies ist die charakteristische Zeitskala der Homogenisierung von Unterschieden in der Zusammensetzung innerhalb eines Teilchens der Größe a. In Abbildung (6.3) ist diese Zeitskala als Funktion der Temperatur für Teilchengrößen von $a = 0.1$ und $0.01\,\mu$m aufgetragen.

Dies wird mit der charakteristischen Kühlungszeitskala

$$t_{\text{cool}} = \frac{r}{v_{\text{exp}}} \tag{6.39}$$

in dem ausströmenden Gas verglichen, bei der r der radiale Abstand ist und $v_{\rm exp}$ die Expansionsgeschwindigkeit. Wird der Einfachheit halber eine graue Temperaturstruktur

$$T(r) = \frac{T_{\rm eff}}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{R_*}{r}} \tag{6.40}$$

angenommen, legt dies $\tau_{\rm cool}$ als Funktion der Temperatur T fest. Für einen Stern mit $T_{\rm eff} = 2\,500\,{\rm K}$, $L_* = 10^4\,{\rm L}_\odot$ und einer Expansionsgeschwindigkeit von $v_{\rm exp} = 10\,{\rm km\,s^{-1}}$ ist die sich ergebende Kühlungszeitskala in Abb. (6.3) aufgetragen.

Eine Betrachtung dieser Abb. ergibt, dass die Homogenisierungszeitskala für Teilchen der Größe $0.1\,\mu$m bei Temperaturen $T \gtrsim 550\,{\rm K}$ kleiner ist als die Kühlungszeitskala. Da aufgrund schneller Verdünnung des Gases durch hohe Überschallexpansion des Windmaterials normalerweiser das Teilchenwachstum bei solch niedrigen Temperaturen bereits unterdrückt ist, kommt man zu dem Schluß, dass Kationdiffusion in Magnesiowüstit schnell genug ist, dass sich innerhalb eines Magnesiowüstitteilchens der Größe $a \lesssim 0.1\,\mu$m keine bedeutenden Gradienten in der chemischen Zusammensetzung aufrecht erhalten können. Die Magnesiowüstitteilchen haben innen eine homogene chemische Zusammensetzung, welche sich jedoch mit dem radialen Abstand r zum Stern ändern kann.

6.4 Spinodal Zersetzung von Magnesiumwüstit

Magnesiowüstit ist ein nichtidealer Mischkristall von Wüstit ($Fe_{1-\delta}$) und Periklas (MgO). Der Einfachheit halber wird der Fe_2O_3-Bestandteil für den Moment vernachlässigt und nur die Mischung von FeO und MgO betrachtet.

Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c können sich nichtideale Mischkristalle in zwei Phasen mit unterschiedlichen Zusammensetzungen entmischen. Dieses Entmischen tritt auf, wenn der Graph der freien Mischenthalpie

$$\begin{aligned} \Delta G_{\rm mix} \;&=\; RT\Big(x_{\rm MgO}\ln x_{\rm MgO} + x_{\rm FeO}\ln x_{\rm FeO} \\ &\qquad + x_{\rm MgO}\ln\gamma_{\rm MgO} + x_{\rm FeO}\ln\gamma_{\rm FeO}\Big) \end{aligned} \tag{6.41}$$

in einem bestimmten Intervall der Mischungsverhältnisse $x_{\rm MgO}$ von unten konkav wird, damit das Entmischen in zwei Phasen unterschiedlicher Zusammensetzung die freie Enthalpie senkt (siehe Philpotts [1990]). In Abbildung (6.4) wurde die freie Mischungsenthalpie (6.41) von MgO und FeO (ohne Fe_2O_3) als Funktion des Molanteils $x_{\rm MgO}$ und der Temperatur T aufgetragen. Wie die Abb. zeigt, beginnen die Kurven bei etwa $T = 400\,{\rm K}$ einen konkaven Teil zu entwickeln (gestrichelte Linie). Unterhalb dieser Temperatur wird Magnesiowüstit instabil gegenüber dem Entmischen (spinodale Zersetzung).

Das Entmischen erfordert jedoch, dass Kationen eine gewisse Strecke in das Gitter diffundieren, um in zwei Bestandteile unterschiedlicher Zusammensetzung zu zerfallen. Es bilden sich normalerweise am Beginn der Entmischung Lamellen auf Skalen der Ordnung $0.01\,\mu$m (z.B. Putnis [1995]). Die Abbildung (6.3) zeigt, dass die

Kühlung im Sternwind zu schnell erfolgt, sodass bei Temperaturen, bei denen Magnesiowüstit instabil gegenüber Entmischen wird, ein Entmischen selbst auf räumlichen Skalen der Ordnung 0.01 μm unmöglich ist. Spinodale Zersetzung ist unter Sternwindbedingungen kinetisch verboten.

6.5 Bildung von Magnesiumwüstit im Nichtgleichgewicht

In diesem Abschnitt wird das Wachstum von Magnesiowüstitteilchen unter Nichtgleichgewichtsbedingungen in einer stellaren Ausströmung behandelt. Der Einfachheit halber wird der kleine Anteil von Fe_2O_3 im Mischkristall vernachlässigt und Teilchen mit der Zusammensetzung $Mg_xFe_{1-x}O$ behandelt. Man sollte jedoch bedenken, dass in realen Teilchen ein Anteil von $\lesssim 1\%$ der Fe^{2+} Kationen durch Fe^{3+} Kationen ersetzt ist.

6.5.1 Teilchenwachstum

Das Rohmaterial, aus dem sich Magnesiowüstit in Materie mit kosmischer Standardelementhäufigkeit und bei Temperaturen und Druckbedingungen, wie sie in stellaren Ausströmungen herrschen ($T < 1\,000$ K, $P \approx 10^{-10}$ bar), bildet, besteht aus freien Mg- und Fe-Atomen und H_2O-Molekülen aus der Gasphase. Da die Häufigkeit von H_2O in der Gasphase viel höher ist als die von Mg und Fe, ist anzunehmen, dass das Wachstum von $Mg_xFe_{1-x}O$ durch den Anlagerun von Mg und Fe bestimmt wird, und dass sich die Anlagerunsrate von O an die wachsenden Teilchen mittels der Reaktion mit H_2O-Molekülen immer den Anlagerungsraten von Mg und Fe anpasst.

Bezeichnet $J^{\rm gr}$ die Wachstumsrate pro Zeite- und Oberflächeneinheit, dann hat man

$$J^{\rm gr}_{\rm Mg} = \alpha_{\rm Mg} v_{\rm th,Mg} n_{\rm Mg} \tag{6.42}$$

$$J^{\rm gr}_{\rm Fe} = \alpha_{\rm Fe} v_{\rm th,Fe} n_{\rm Fe} \tag{6.43}$$

wobei n die Teilchendichte bezeichnet,

$$v_{\rm th} = \sqrt{\frac{2kT}{\pi m}} \tag{6.44}$$

die mittlere thermische Geschwindigkeit der Teilchen (m =Teilchenmasse) und α den Wachstums(sticking)koeffizienten.

Der Magnesiowüstitdampf enthält Fe und Mg nur als freie Atome. Die Häufigkeit von FeO- und MgO-Molekülen im Dampf ist vernachlässigbar. Die Verdampfungsraten $J^{\rm vap}$ pro Zeit- und Oberflächeneinheit von Mg und Fe in die Gasphase durch Verdampfung von Magnesiowüstit sind dann

$$J^{\rm vap}_{\rm Mg} = \alpha_{\rm Mg} v_{\rm th,Mg} \frac{p_{v,\rm Mg}}{kT} \tag{6.45}$$

$$J^{\rm vap}_{\rm Fe} = \alpha_{\rm Fe} v_{\rm th,Fe} \frac{p_{v,\rm Fe}}{kT}\,, \tag{6.46}$$

wobei in einem chemischen Gleichgewichtszustand p_v der Partialdruck von Mg oder Fe im $Mg_xFe_{1-x}O$ Dampf ist.

Es seien N_{Mg} und N_{Fe} die entsprechenden Gesamtzahlen an Mg- und Fe-Kationen, die in einem Teilchen enthalten sind. Die Gesamtzahl an Sauerstoff-Anionen, die gleich der Gesamtzahl der in einem Teilchen enthaltenen Einheitszellen des kubischen Magnesiowüstitgitters ist, lautet

$$N_c = N_{\mathrm{Mg}} + N_{\mathrm{Fe}}\,. \tag{6.47}$$

Das Teilchenvolumen ist

$$V_{\mathrm{gr}} = N_c a_0^3 \tag{6.48}$$

wobei a_0 die Gitterkonstante von Magnesiowüstit ist. Die Teilchenoberfläche ist

$$A_{\mathrm{gr}} = 6N_c^{\frac{2}{3}} a_0^2\,. \tag{6.49}$$

Die kubische Gestalt von weniger als mikrometergroßen MgO-Teilchen kann schön in Abb. (6.4) in Rietmeijer et al. [1999a] und Abb. (6.2) in Rietmeijer et al. [2002] gesehen werden.

Das Wachstum von Magnesiowüstitteilchen wird entsprechend der gemachten Annahmen durch die Gleichungen

$$\frac{\mathrm{d}N_{\mathrm{Mg}}}{\mathrm{d}t} = A_{\mathrm{gr}}\left(J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{vap}}\right) \tag{6.50}$$

$$\frac{\mathrm{d}N_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} = A_{\mathrm{gr}}\left(J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{vap}}\right)\,. \tag{6.51}$$

beschrieben. Durch Addition dieser zwei Gleichungen erhält man eine Gleichung für die Kantenlänge

$$a_{\mathrm{gr}} = N_c^{\frac{1}{3}} a_0 \tag{6.52}$$

der Magnesiowüstitwürfel

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{gr}}}{\mathrm{d}t} = 2a_0^3\left(J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{vap}} + J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{vap}}\right)\,. \tag{6.53}$$

Für den Molenbruch

$$x_{\mathrm{FeO}} = \frac{N_{\mathrm{Fe}}}{N_{\mathrm{Mg}} + N_{\mathrm{Fe}}} \tag{6.54}$$

von FeO in den Teilchen erhält man die Gleichung

$$\frac{\mathrm{d}x_{\mathrm{FeO}}}{\mathrm{d}t} = \frac{6a_0^3}{a_{\mathrm{gr}}}\Big[(1 - x_{\mathrm{FeO}})\left(J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Fe}}^{\mathrm{vap}}\right) - x_{\mathrm{FeO}}\left(J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{gr}} - J_{\mathrm{Mg}}^{\mathrm{vap}}\right)\Big]\,. \tag{6.55}$$

Das Gleichungssystem (6.53) und (6.55) beschreibt die Größenänderung und Zusammensetzung der Magnesiowüstitteilchen unter Nichtgleichgewichtsbedingungen. Durch die Bildung von Magnesiowüstit muss der Verbrauch an H_2O, Fe und Mg aus der Gasphase analog zu den Gln. (4.76), (4.78), (4.79) in Kapitel 4 berücksichtigt werden.

6.5.2 Berechnung des Dampfdrucks

Um die Gln. (6.53) und (6.55) zu lösen, muss man die Dampfdrucke $p_{v,\mathrm{Mg}}$ und $p_{v,\mathrm{Fe}}$ in (6.45) und (6.46) kennen. Diese werden, wie in Abschnitt 6.2.3 beschrieben, für die sauerstoffreiche Elementmischung einer stellaren Ausströmung berechnet, jedoch mit der Vereinfachung, dass der Bestandteil Fe_2O_3 im Mischkristall vernachlässigt wird:

$$p_{v,\mathrm{Mg}} = x_{\mathrm{MgO}}\gamma_{\mathrm{MgO}}\, p^*_{v,\mathrm{Mg}} \tag{6.56}$$

$$p_{v,\mathrm{Fe}} = x_{\mathrm{FeO}}\gamma_{\mathrm{FeO}}\, p^*_{v,\mathrm{Fe}}\,, \tag{6.57}$$

wobei

$$p^*_{v,\mathrm{Mg}} = \frac{p_{\mathrm{H_2}}}{p_{\mathrm{H_2O}}}\,\mathrm{e}^{-\Delta G_2/RT} \tag{6.58}$$

$$p^*_{v,\mathrm{Fe}} = \frac{p_{\mathrm{H_2}}}{p_{\mathrm{H_2O}}}\,\mathrm{e}^{-\Delta G_1/RT} \tag{6.59}$$

die Dampfdrucke der reinen Bestandteile MgO(s) und FeO(s) im chemischen Gleichgewicht mit der Gasphase sind.

6.5.3 Beziehung zwischen den Stickingkoeffizienten

Die Beziehung zwischen der Verdampfungsraten von Mg- und Fe-Atomen von der Oberfläche eines Magnesiowüstitteilchens der Zusammensetzung $\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{1-x}$ ist nicht bekannt. Verändert die Verdampfung die Zusammensetzung von Magnesiowüstit nicht, hat man

$$\alpha_{\mathrm{Fe}} = \alpha_{\mathrm{Mg}}\,\frac{v_{\mathrm{th,Mg}}}{v_{\mathrm{th,Fe}}}\,. \tag{6.60}$$

Dies wird als richtig angenommen, solange keine experimentellen Werte verfügbar sind.

Der Stickingkoeffizient von reinem MgO wurde von Hashimoto [1990] aus Verdampfungsexperimenten bestimmt. Es wurde ein Wert von etwa $\alpha = 0.2$ bestimmt, der in diesen Modellrechnungen auch für den MgO-Teil von Magnesiowüstit verwendet wird. Der Koeffizient α_{Fe} wird aus (6.60) bestimmt.

6.5.4 Wachstumszentren

Die Berechnungen wurden unter der vereinfachenden Annahme durchgeführt, dass das Magnesiowüstit um einen bereits existierenden Keim wächst.

Für die Keime wird eine Größe von $1nm$ angenommen, die Teilchendichte wurde jedoch in dieser Modellrechnung von 1×10^{-13} auf 3×10^{-13} Keime pro Wasserstoffkern erhöht. Der Grund war, dass die niedrigere Keimzahl insgesamt zu kleine Kondensationsgrade der Silikate und möglicherweise zu große Silikatstaubteilchenradien zu ergeben schien, welche dann größer waren als die obere Grenze der von Jura [1996] gefundenen Größenverteilung. Mit der neuen Wahl der Keimzahldichte sind die Ergebnisse der Modellrechnung in besserer Übereinstimmung mit Juras Ergebnissen.

6.6 Magnesiumwüstit in zirkumstellaren Hüllen

6.6.1 Windmodell

Es wurden einige Rechnungen durchgeführt, um festzustellen, ob sich Magnesiowüstit im Sternwind um Sterne in spätem Stadium bilden kann. Die Rechnungen basieren auf vereinfachten Windmodell, siehe Gail & Sedlmayr [1999]; Ferrarotti & Gail [2001, 2002]. Ein stationärer, sphärisch symmetrischer Wind tritt aus der Atmosphäre eines Sterns mit

$$L_* = 2 \times 10^4 \, \mathrm{L}_\odot, \quad M_* = 1 \, \mathrm{M}_\odot, \quad T_{\mathrm{eff}} = 3\,000 \, \mathrm{K} \tag{6.61}$$

aus. Er dringt in das Staubentstehungsgebiet mit einer angenommenen Geschwindigkeit von $1 \, \mathrm{km\,s^{-1}}$ ein und wird durch Strahlungsdruck auf die Staubteilchen auf Überschallgeschwindigkeit beschleunigt, sobald die Staubbildung einsetzt.

6.6.2 Staubmodell

Die Modelle werden für eine sauerstoffreiche Elementmischung mit Häufigkeiten nach Anders & Grevesse [1989] und Grevesse & Noels [1993] berechnet. Die Staubsorten, die in den vorherigen Nichtgleichgewichtskondensationsrechnungen behandelt wurden, waren Olivin ($\mathrm{Mg}_{2x}\mathrm{Fe}_{2(1-x)}\mathrm{SiO}_4$), Pyroxen ($\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{1-x}\mathrm{SiO}_3$), Eisen (Fe), Quarz ($\mathrm{SiO}_2$) und Periklase (MgO) (Gail & Sedlmayr [1999]; Ferrarotti & Gail [2001, 2002]).

Die Kondensationsrechnung für MgO ist hier um die Berechnung der Magnesiowüstitkondensation erweitert worden, d.h. die Gln. (6.53) und (6.55) werden simultan mit den Gleichungen der anderen Staubsorten und des Sternwinds gelöst.

6.6.3 Ergebnisse der Magnesiumwüstitkondensation

Die Abbildung (6.5) zeigt in den beiden linken Bildern die radiale Variation der entsprechend Kondensationsgrade f_{Mg} und f_{Fe} von Mg und Fe in Magnesiowüstit, und in den beiden rechten Bildern den Molbruchteil von FeO in Magnesiowüstit. Ein wird ein Windmodell mit einer Massenverlustrate von $\dot{M} = 3 \times 10^{-6} \, \mathrm{M}_\odot \, \mathrm{a}^{-1}$ angenommen.

Die Abbildung (6.5)a zeigt den Anstieg der Kondensationsgrade von Mg und Fe in Magnesiowüstit, sowie sich eine Gaselemente nach außen bewegt. Zuerst bildet sich nahezu reines Periklas mit nur einem verschwindendem Bruchteil des Fe enthaltenden Endprodukts FeO im Mischkristall. Der Einbau von FeO in den Mischkristall beginnt mit beträchtlicher Verzögerung, bis das Gaspaket zu einer niedrigeren Temperatur gelangt ist. Die Abbildung (6.5)c zeigt wiederum die Kondensationsgrade von Mg und Fe in Magnesiowüstit, diesmal jedoch als Funktion der Temperatur. Der Vergleich mit Abb. (6.1) zeigt, dass ein massiver Einbau von FeO in $\mathrm{Fe}_x\mathrm{Mg}_{1-x}\mathrm{O}$ bei etwa 850 K beginnt, was ungefähr die Temperatur ist, bei der die Stabilitätsgrenze der Kondensation von reinem FeO von oben gekreuzt wird (siehe auch den linken Teil von Abb. (6.2)). Oberhalb dieser Temperatur ist der Fe-Anteil im Mischkristall nur gering, unterhalb bildet sich ein Mischkristall mit einem Fe-Anteil von fast 40%,

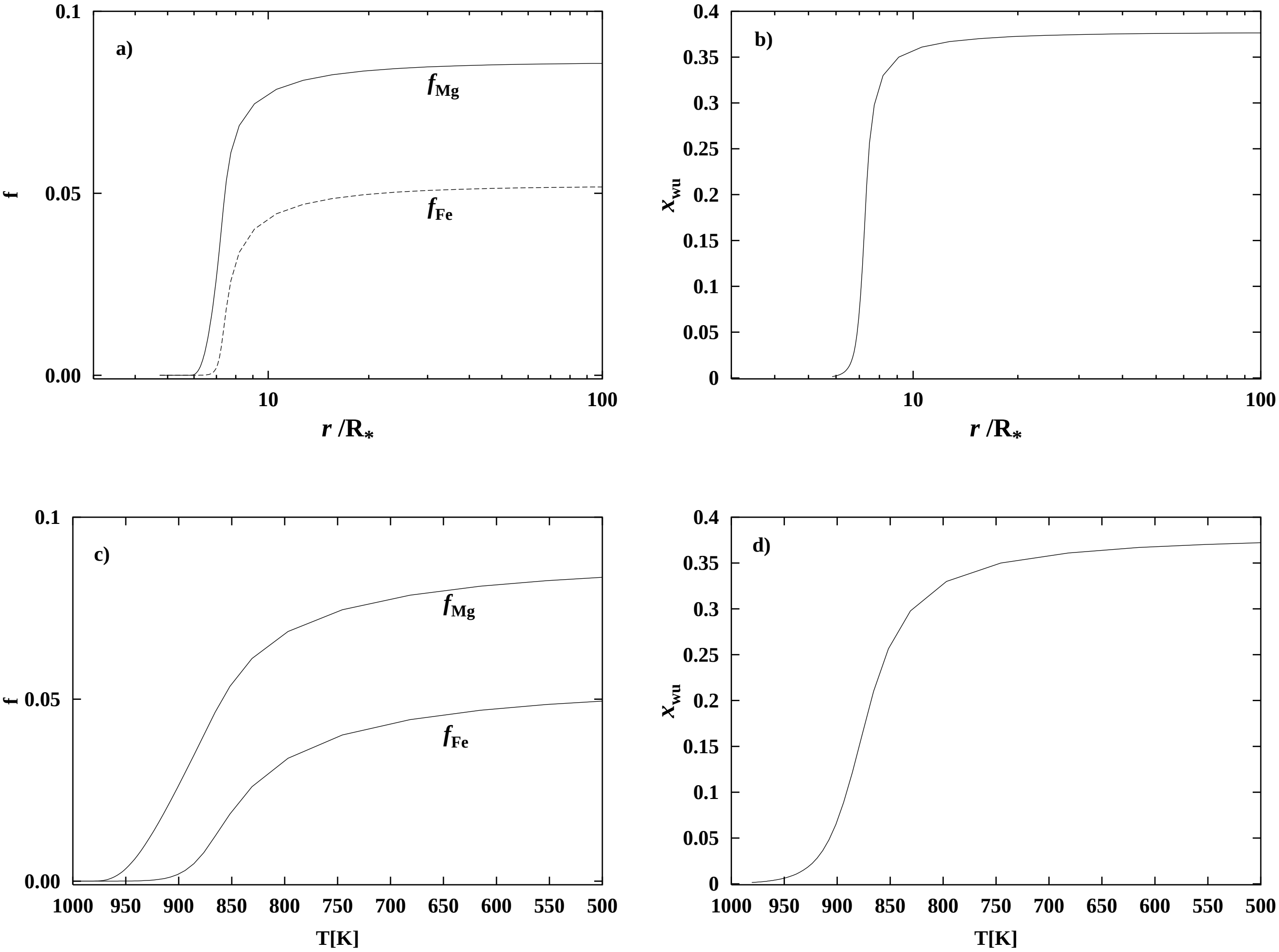

Abbildung 6.5 Kondensationsgrad f von Mg und Fe in Magnesiumwüstit als Funktion der radialen Entfernung (oben) und als Funktion der Windtemperatur (unten). Die Bilder **(a)** und **(c)** zeigen die Bruchteile f_{Mg} und f_{Fe} von Mg und Fe, die in Magnesiumwüstit kondensieren. **(b)** und **(d)** zeigen den Molenbruch x_{FeO} von FeO in Magnesiumwüstit. Windmodell mit $\dot{M} = 3 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

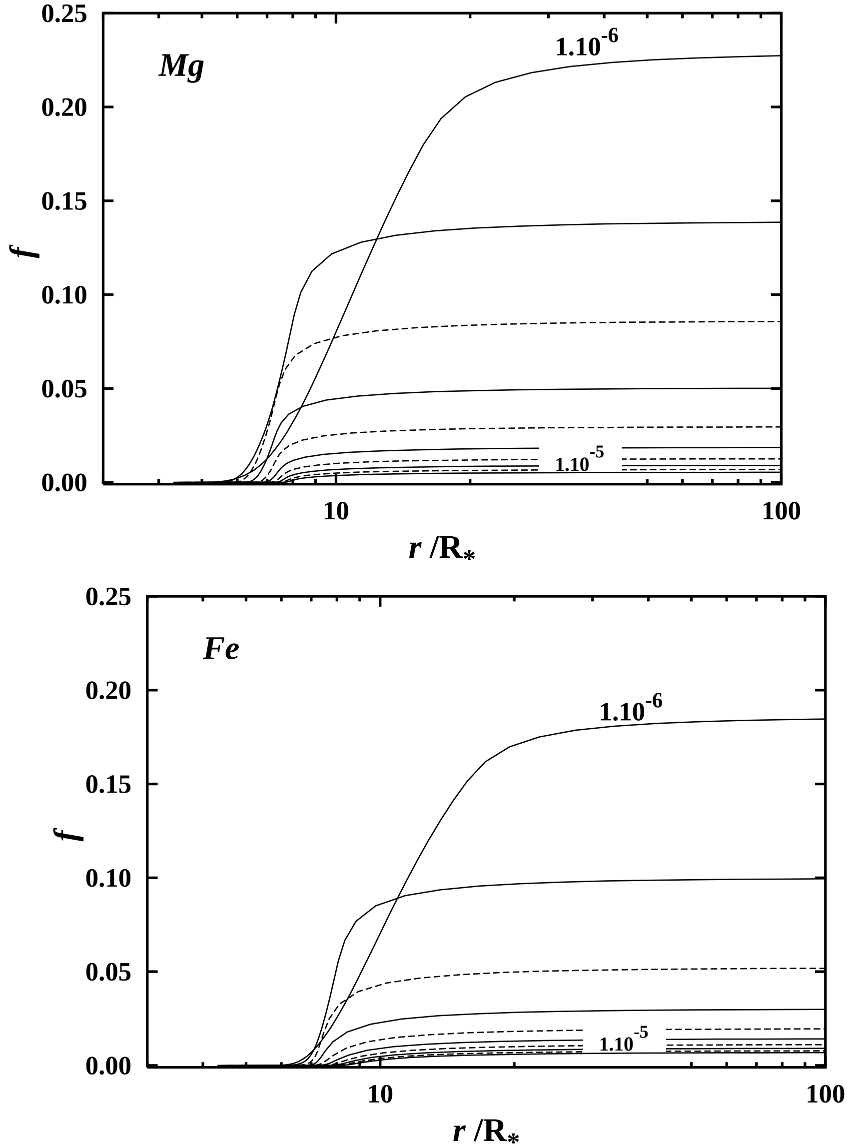

Abbildung 6.6 Radiale Variation des Kondensationsgrads f von Mg und Fe in Magnesiumwüstit für verschiedene Massenverlustraten $\dot{M} = 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ und $\dot{M} = 1 \times 10^{-5}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ in $10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ Schritten.

wie in den Abb. (6.5)b und (6.5)d zu sehen ist. Der Fe-Anteil bleibt, trotz eines viel höheren Partialdrucks der Fe-Atome als der Mg-Atome in der Gasphase, geringer als 50%, da vor Einsetzen der FeO-Kondensation bereits beträchtliche Mengen an Mg als nahezu reines MgO kondensiert sind.

Die Abbildung (6.6) zeigt die radiale Änderung der Kondensationsgrade von Mg und Fe in Magnesiowüstit bei verschiedenen Massenverlustraten. Mit steigender Massenverlustrate sinkt die Menge an Magnesiowüstit, das sich im Sternwind bildet. Der Grund hierfür ist, dass Olivin das erste häufige Kondensat im Wind ist, welches bei einer wesentlich höheren Temperatur zu kondensieren beginnt als Magnesiowüstit (siehe Abb.(6.1)). Je höher die Massenverlustrate ist, desto früher ist eine ausreichende Menge Silikatstaub kondensiert, um den Wind auf hohe Überschallgeschwindigkeit zu treiben. Rasche Verdünnung des ausströmenden Gases hindert Staubsorten, die erst nach einer bedeutenden Beschleunigung zu kondensieren beginnen, ernsthaft an ihrer Kondensation. Magnesiowüstit beginnt bei Massenverlustraten von $\dot{M} \lesssim 4 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ zu kondensieren, bevor durch Strahlungsdruck auf die Silikate eine starke Beschleunigung stattgefunden hat. Bei Massenverlustraten von $\dot{M} \gtrsim 4 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ist die Kondensation von Magnesiowüstit im Wesentlichen unterdrückt, das die Windgeschwindigkeit bereits viel zu hoch ist.

Es bilden sich bei Massenverlustraten von $\dot{M} \lesssim 4 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ keine großen Mengen Magnesiowüstit, nur in der Ordnung von bis zu 20% des verfügbaren kondensierenden Materials. Die Mengen sind jedoch nicht vernachlässigbar und sollten zu der Opazität des zirkumstellaren Staubmaterials beitragen. Da viele der sauerstoffreichen Sterne Massenverlustraten von $\dot{M} \lesssim 4 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ besitzen (siehe Habing [1996]; Loup et al. [1993]) oder sogar geringe Massenverlustraten von einigen $10^{-7}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ (Olofsson et al. [2002]), ist Magnesiowüstit möglicherweise ein weitverbreitetes zirkumstellares Staubmaterial in Objekten mit Massenverlustraten unterhalb etwa $2 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$.

6.6.4 Berechnung des IR-Spektrum der Staubhülle

Es wird testweise für ein Windmodell mit $\dot{M} = 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ das emittierte Infrarotspektrum einer zirkumstellaren Staubhülle berechnet. Das Temperatur-Dichteprofil und die radiale Abhängigkeit der Kondensationsgrade der unterschiedlichen Staubspezies (amorphes Olivin und Pyroxen, metallisches Eisen, Quarz und Magnesiowüstit) wurden dem Windmodell entnommen. Der Strahlungstransport in der kugelsymmetrischen Staubhülle wird mit dem p-z-Verfahren berechnet, wobei die Transportgleichung entlang von Strahlen mit der Feautrier-Methode gelöst wird. Die Absorption von Magnesiowüstitteilchen wurde für kleine Würfel berechnet (siehe Anhang C), deren Seitenlängen aus der Lösung der Gln. (6.53) und (6.55) bestimmt werden. Denn die Kondensationsexperimente von Rietmeijer et al. [1999a, 2002] zeigen deutlich, dass Magnesiowüstit selbst auf nm-Skala würfelförmig ist, obwohl auf diesen kleinen Skalen andere Staubsorten häufig rundliche Körner bilden, die durch Ellipsoide oder Kugeln genähert werden können. Für die optischen Konstanten von Magnesiowüstit wurde der Datensatz für die Zusammensetzung $\mathrm{Mg_{0.6}Fe_{0.4}O}$ aus Henning et al. [1995] verwendet. Die Abbildung (6.7) zeigt das berechnete Emissionsspektrum mit (durchgezogene Linie) und ohne (gestrichelte Linie) Berücksichtigung von Magnesiowüstit als Absorber. Da Magnesiowüstit, wie Abb. (6.6) zeigt,

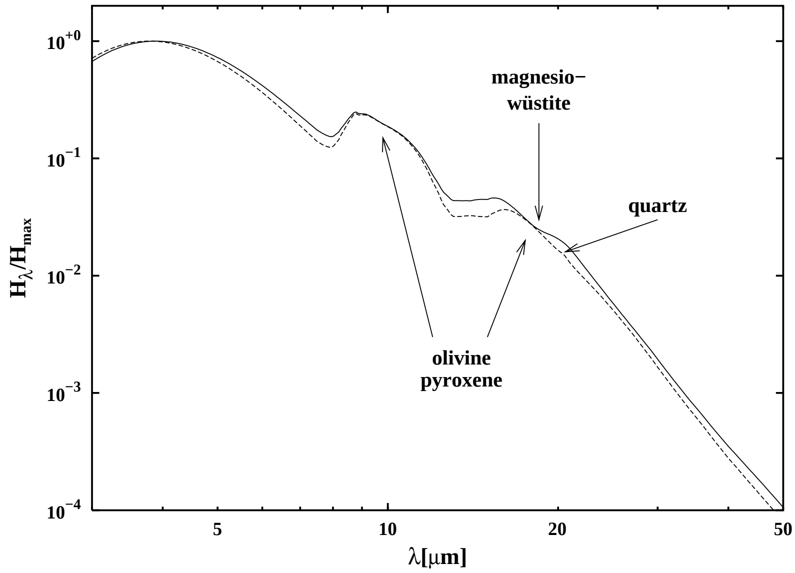

Abbildung 6.7 Spektrale Energieverteilung einer Staubhülle. Windmodell mit $\dot{M} = 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$. Mit MgFeO als Absorber (durchgezogene Linie), ohne MgFeO als Absorber (gestrichelte Linie).

nur eine wenig bedeutende Staubsorte ist, sind die Unterschiede in dem emittierten Fluß gering, jedoch nicht vernachlässigbar. In dem Resonanzbereich um $\lambda \approx 19\,\mu$m, siehe Abb. (C.1) in Anhang C , b ewirkt Magnesiowüstit eine kleine Einsenkung in dem Fluß, die auf der Schulter des breiten $18\,\mu$m Emissionsbandes der Silikaten sitzt. Das Feature ist bei Modellspektren für Windmodelle mit $\dot{M} \gtrsim 2 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ schwer zu erkennen, wird jedoch für $\dot{M} \leq 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ bedeutsam. Vielleicht wird das Magnesiowüstitfeature für $\dot{M} \leq 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ein wichtiges Feature, das hier verwendete Modellprogramm kann keine selbstkonsistenten Windmodelle mit $\dot{M} < 1 \times 10^{-6}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ berechnen, da angenommen wird, dass der Überschallwind durch Staubkondensation angetrieben wird, was bei sehr kleinen Massenverlustraten unmöglich ist (Gail & Sedlmayr [1987]).

Molster [2000] und Molster et al. [2002b] entdeckten in einigen zirkumstellaren Staubhüllen ein Staubfeature, dessen Peaks direkt unter $19\,\mu$m liegen, was mit den häufigen Silikatstaubspezies nicht klar in Beziehung gebracht werden kann. Posch et al. [2002] findet ein Feature bei etwa $19.5\,\mu$m in den ISO-Spektren einiger Objekte mit eher niedrigen Massenverlustraten und schlägt Magnesiowüstit als Träger vor. Dieses Feature bei $\approx 19\,\mu$m befindet sich im Wesentlichen bei der gleichen Wellenlänge, die in der Modellrechnung bestimmt wurde. Die im Vergleich zu dem von Posch et al. [2002] beobachteten Feature etwas geringere Wellenlänge des Features im Modell liegt sicherlich an dem anderen Eisenanteil in der Modellrechnung. Der berechnete Molenbruchteil von FeO in Magnesiowüstit hängt von den Stickingkoeffizienten α von Mg und Fe ab, welche nicht mit ausreichender Genauigkeit bekannt sind.

In dieser Rechnung scheint das Feature etwas schwächer als das beobachtete Feature zu sein, doch mag dies eine Folge der speziellen Modellparameterwahl für den Wind (Abschnitt 6.6.1) oder der speziellen Wahl der Keimdichte zu sein (Abschnitt

6.5.4). Die Koinzidenz zwischen dem berechneten Magnesiowüstitfeature und dem beobachteten Feature mag darauf hinweisen, dass Magnesiowüstit tatsächlich eine der vielen Staubsorten ist, die sich im Sternwind sauerstoffreicher spätere Sterne mit niedriger Massenverlustrate bilden.

6.7 Zusammenfassung

Es wurde detailiert die Möglichkeit der Bildung von Stauboxiden mit der Zusammensetzung $Mg_{1-x}Fe_xO$ in zirkumstellaren Staubhüllen untersucht. In der Vergangenheit wurde wiederholt vermutet, dass Eisenoxidteilchen existieren und möglicherweise durch Festkörperabsorptionsbanden im fernen Infrarotspektrum gemessen werden könnten. Es wurde hier gezeigt, dass zu Magnesiowüstit genügend Labordaten zur Verfügung stehen, um seine Kondensation unter Nichtgleichgewichtsbedingungen zu berechnen, mit dem Ergebnis, dass es sich möglicherweise in ausreichender Menge bildet, um als weniger bedeutende Staubsorte messbar zu sein. Die berechnete Wellenlänge der Magnesiowüstitresonanz stimmt mit einem noch nicht identifiziertem Staubfeature überein, das in einigen sauerstoffreichen zirkumstellaren Staubhüllen entdeckt wurde. Dies mag ein Hinweis darauf sein, dass Magnesiowüstit tatsächlich in solchen Hüllen existiert. Für eine definitive Identifikation dieser Staubsorte sind detailiertere Modellrechnungen erforderlich.

7. Synthetische AGB Entwicklungen

7.1 Einführung

Sterne zwischen $1M_\odot$ und $25M_\odot$ erreichen entweder den asymptotischen Riesenast (AGB) und werden Weisse Zwerge, oder sie erreichen den Roten Riesen Ast und enden in einer Supernovaexplosion. Die letzte Entwicklungsphase kurz vor dem Erreichen des Endstadiums wird regelmässig von massivem Massenverlust in Form eines Sternwinds und von Staubbildung in dem ausströmenden Gas begleitet. Bei Pop I Metallizität Z wird der Massenverlust durch Staubkondensation angetrieben, was für sehr niedrige Z nicht möglich ist. Die Entwicklung dieser Sterne zum Endstadium hängt dadurch von der Staubbildung ab. Der Prozess der Staubbildung ist sehr wichtig. Einerseits erleichtert die Existenz von Staub im interstellaren Medium durch seine effiziente Kühlung eines Gases die Entstehung der nächsten Sterngeneration und ist dadurch ein wesentlicher Faktor der Sternbildungsrate. Andererseits hängt das Auftreten des massiven Massenverlusts bei Sternen kleiner und mittlerer Masse auf dem oberen Ende des AGB wesentlich von der Metallhäufigkeit ab. In diesem Kapitel soll untersucht werden, in welcher Weise die Staubbildungsprozesse der ersten Sterngeneration von Z und der Anfangsmasse des Sterns abhängen (d.h. dem Entwicklungsweg), ab wann Staubbildung im Sternwind möglich ist und in welcher Weise die Staubbildung auf die weitere Entwicklung der Endphase des Sterns zurückwirkt.

Mit Hilfe der synthetischen AGB-Entwicklungen lassen sich Aussagen über den Massenverlust auf dem AGB und damit über die Staubproduktionsrate und über die Menge des produzierten Staubs machen.

7.2 Synthetische AGB-Entwicklung

Um der Entwicklung entlang des TP-AGB-Stadiums zu folgen, wird ein semianalytisches Verfahren nach Groenewegen & de Jong [1992] und Marigo et al. [1996], verwendet. Solche Modelle wurden entwickelt, weil die explizite Berechnung der Sternentwicklung in dieser Phase so aufwendig ist, dass bisher nur sehr weniger Modelle berechnet wurden. Die synthetischen Modelle sind geeignet, um die Entwicklung auf dem TP-AGB nährungsweise zu beschreiben. Die Modellierung wird mit dem ersten thermischen Puls begonnen.

Die Annahmen und physikalische Bedingungen für das TP-AGB-Modell sind:

1. Anfangsbedingungen der Sterne bei dem ersten thermischen Puls: Sternmodelle von Schaller et al. [1992]
2. Analytische Vorschriften, die aus den vollständigen Entwicklungsrechnungen abgeleitet wurden, zur Beschreibung der:
   - Kernmasse-Leuchtkraft-Beziehung
   - Kernmasse-Interpuls-Perioden-Beziehung
   - Entwicklung von Kern- und Hüllenmasse längs des TP-AGB
   - Effekte des *„third dredge up“*
3. Massenverlust durch stellaren Wind.

Die Anfangsbedingungen, die Gesamtmasse M, die Kernmasse M_c, die Leuchtkraft L, die Effektivtemperatur $T_{\rm eff}$ und die chemische Zusammensetzung bestimmen den physikalischen Zustand der Sterne am Anfang des thermischen Pulsens. M_c ist die Masse des entarteten CO-Kerns und der darüber liegenden He-Schale.

Die Modelle können die Veränderung der Häufigkeiten der Elemente H, ^{3}He, ^{4}He, ^{12}C, ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N, ^{16}O, ^{17}O, ^{18}O, ^{20}Ne, ^{22}Ne, ^{25}Mg und ^{26}Al voraussagen. Diese Veränderungen werden durch den 1., 2. dredge-up vor dem Beginn der TP-AGB-Phase und den 3. dredge-up auf dem TP-AGB induziert. Die Effekte des 1. und 2. dredge-up sind bereits in den Anfangsmodellen von Schaller et al. [1992] enthalten.

7.3 Kernmasse-Leuchtkraft-Beziehung ($M_c - L$)

Die Kernmasse-Leuchtkraft-Relation bezieht sich auf die Leuchtkraft der Sterne während der Interpulsphase. Sie sind reine Fitformeln, die aus numerischen Entwicklungsrechnungen abgeleitet wurden. Für Sterne mit Kernmassen im Bereich $0.5 \leq M_c/M_\odot \leq 0.66$ gilt für die Leuchtkraft der Wasserstoffschalenquelle nach Groenewegen & de Jong [1994]

$$L_{\rm H} = 238\,000 \mu^3 Z_{\rm CNO}^{0.04} (M_c^2 - 0.1802)\,, \tag{7.1}$$

wobei $Z_{\rm CNO}$ die Häufigkeit von Sauerstoff, Stickstoff und Kohlenstoff ist. $\mu = 4/(5X + 3 - Z)$ ist das mittlere Molekulargewicht für vollständig ionisiertes Gas, wobei X die Wasserstoffhäufigkeit und Z die Metallizität ist. Für $M_c/M_\odot \geq 0.95$ gilt nach Groenewegen & de Jong [1994]

$$L_{\rm H} = 122\,585 \mu^2 (M_c - 0.49) M^{0.19}\,, \tag{7.2}$$

wobei $M = M_c + M_{\rm H}$ und $M_{\rm H}$ die Hüllenmasse ist. Im Bereich $0.66 < M_c/M_\odot < 0.95$ wird $L_{\rm H}$ durch lineare Interpolation berechnet.

7.4 Kernmasse-Interpuls-Perioden-Beziehung ($M_\mathrm{c} - T_\mathrm{ip}$)

Die charakteristische Zeitskala für einen thermischen Puls ist das Zeitintervall T_ip zwischen zwei aufeinander folgenden Pulsen. Sie nimmt mit der Kernmasse ab. Für T_ip wurden die Ergebnisse aus Vassiliadis & Wood [1993] verwendet, die für $Z = 0.02$

$$\log T_\mathrm{ip} = 4.5(1.689 - M_\mathrm{c}) \tag{7.3}$$

und für $Z = 0.001$

$$\log T_\mathrm{ip} = 4.95(1.644 - M_\mathrm{c}) \tag{7.4}$$

ergeben. T_ip ist in Jahren ausgedrückt. Für andere Metallizitäten Z wird zwischen den beiden Werten linear Interpoliert.

7.5 Die Entwicklungsrate

Die Entwicklungsrate der Sterne auf den TP-AGB wird durch das Wachstum der Kernmasse bestimmt. Für die Zunahme der Kernmasse durch Wasserstoffbrennen gilt

$$\frac{\mathrm{d}M_\mathrm{c}}{\mathrm{d}t} = 9.555\ 10^{-12}\ \frac{L_\mathrm{H}}{X} \tag{7.5}$$

(Groenewegen & de Jong [1994]), wobei M_c die Kernmasse in Sonnenmassen, X die Wasserstoffhäufigkeit der Hülle und L_H ist die Leuchtkraft der Wasserstoffschalenquelle ist. Diese Gl. ist zusammen mit der Gl. für L_H eine DGL für M_c, die in den Zeitintervallen T_ip zwischen zwei Pulsen numerisch gelöst werden muss.

7.6 Effektivtemperatur

Für die Beiträge der Kontraktionsenergie und des He-brennens zur Gesamtleuchtkraft wird folgende Fitformel

$$L = L_\mathrm{H} + 2\,000\,(M/7)^{0.4} \exp[3.45(M_\mathrm{c} - 0.96)] \tag{7.6}$$

verwendet (Groenewegen & de Jong [1994]). Alle Variable sind in Sonneneinheiten ausgedrückt.

Aus der Gesamte Leuchtkraft L und der gesamte Masse M wird die Effektivtemperatur und der Radius des Sterns nach Gln.15 aus Groenewegen & de Jong [1992] berechnet.

7.7 Massenverlust

Der Massenverlust durch einen stellaren Wind spielt eine wichtige Rolle in der Sternentwicklung. Er bestimmt die Endmasse der Sterne auf dem AGB und dadurch die maximale Leuchtkraft, die ein Stern auf dem AGB erreichen kann, und er beeinflusst die innere Struktur.

Die Sterne auf dem TP-AGB befinden sich im HR-Diagramm in einem Instabilitätsgebiet, in dem sie alle Mira-Veränderlliche oder Langperiodische Veränderliche sind. Durch die Stoßwellen in der äußeren Hülle des Sterns, die durch die Pulsationen ausgelöst werden, wird ein Sternwind angetrieben (z.B. Willson [2000]) Bei genügend hohen Massenverlustraten ($\dot{M} \geq 10^{-7} M_\odot a^{-1}$) kondensieren im Sternwind Staubpartikel und ab ca. $10^{-6} M_\odot a^{-1}$ ist der Strahlungsdruck auf Staub hoch genug, dass Strahlungsdruck auf Staub den Wind antreibt.

Man muss deswegen für den Massenverlust auf den AGB zwei Phasen unterscheiden (Marigo et al. [1996]). Für Pulsationsperioden $P \leq 500$ Tage sind die Massenverlustraten niedrig und der Wind wird durch Pulsation angetrieben. Die Pulsationsperiode ist durch die der Periode-Massen-Beziehung

$$\log P = -2.07 + 1.94 \log R - 0.9 \log M \tag{7.7}$$

gegeben. P ist in Tagen, der Sternradius R und die Masse sind in Sonneneinheiten. Die Massenverlustrate ist in diesen Fall

$$\log \dot{M} = -11.4 + 0.00123\, P\,. \tag{7.8}$$

Für $P \geq 500$ Tage wird der Wind durch die Kondensation von Staub angetrieben. In diesen Fall gilt

$$\dot{M} = 6.07023\, 10^{-3}\, \frac{L}{c v_{\mathrm{exp}}}\,. \tag{7.9}$$

In beiden Fällen ist $\dot{M}$ in $M_\odot\, a^{-1}$ angegeben, die Leuchtkraft ist in $L_\odot$, die Pulsationsperiode P in Tagen. Diese Beziehungen wurde von Vassiliadis & Wood [1993] aus beobachteten Massenverlustraten von Miras und LPVs in der Galaxis und den Magellanschen Wolken abgeleitet.

Die Expansionsgeschwindigkeit v_{exp} des Winds ist

$$v_{\mathrm{exp}} = -13.5 + 0.056 P\,. \tag{7.10}$$

Die Lichtgeschwindigkeit c und die Windgeschwindigkeit v_{exp} sind in $\mathrm{km\,s^{-1}}$ angegeben. Auch die Gleichung (7.10) wurde aus Beobachtungen von Vassiliadis & Wood [1993] abgeleitet.

Durch den Massenverlust auf dem TP-AGB geht die äußere wasserstoffreiche Hülle verloren. Gleichzeitig wächst der CO-Kern auf Kosten der Hülle. Die Änderung der Hüllenmasse ist

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t} = -\dot{M}_{\mathrm{wind}} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{7.11}$$

Die TP-AGB-Phase ist beendet, wenn entweder die Hülle abgeworfen ist, oder wenn die Kernmasse ca. $1.4 M_\odot$ erreicht hat (Chandrasekhar Grenze) und der Stern explodiert.

Der Wettlauf zwischen Massenverlust durch den Sternwind und Zunahme der Kernmasse gewinnt für Sterne mit $M \leq 7 M_\odot$ praktisch immer der Sternwind, sodass ein ausgebrannter CO-Kern von $0.6 \ldots 0.9 M_\odot$ zurück bleibt, der zum Weißen Zwerg wird. Nur für Sterne mit Massen $M \geq 7 M_\odot$ scheint in wenigen Fällen die Grenzmasse $M_{\mathrm{c}} = 1.4 M_\odot$ für eine Supernovaexplosion erreicht zu werden, ehe die Hülle verloren gegangen ist.

7.8 Der *„third dredge up“*

Bei Sternen auf der TP-AGB kommt es erneut zu Mischungsvogängen, in denen nuklear prozessiertes Material an die Oberfläche gebracht wird, der *„third dredge up“*. Die wichtigsten Effekte sind:

- Nach dem Zünden der He-Quelle ist die He-Schale kurz konvektiv instabil. Dabei wird ^{12}C aus der He-Schalenquelle an der Grenze zum CO-Kern an die Oberkante der He-Schale transportiert.
- Die äußere Konvektionszone reicht nach dem Puls für kurze Zeit bis in den Bereich der Oberkante der He-Schale hinein. Dadurch werden ^{12}C aus dem He-brennen und ^{4}He aus dem H-Brennen der äußeren Hülle beigemischt.
- Die Kohlenstoffhäufigkeit (ϵ_{C}) relativ zur Sauerstoffhäufigkeit (ϵ_{O}) nimmt nach Beginn des thermischen Pulsens nach jedem Puls stufenweise zu und steigt von Werten C/O$\approx$ 0.4 auf C/O$\approx$ 1.5 an. Wenn $\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}} > 1$ ist, wird der Stern zum Kohlenstoffstern.

Nach jedem Puls nehmen die Häufigkeiten ϵ_{C} und ϵ_{He} in der äußeren Hülle etwas zu. Die Häufigkeit ϵ_{O} der äußeren Hülle bleibt fast unverändert.

Die thermischen Pulse und die damit verbundenen Durchmischungsprozesse sind für die Enstehung von Kohlenstoffsternen verantwortlich. Der third dredge up ist sehr wichtig für der ^{12}C Synthese im Kosmos da AGB-Sterne die Hauptquelle für C sind.

Für eine analytische Behandlung des 3. dredge-up Prozesses benötigen wir drei wesentliche Eingabedaten:

- Minimale Kernmasse $M_{\mathrm{c}}^{\mathrm{min}}$ bei dem der dritte dredge-up beginnt,
- Die Effizienz
$$\lambda := \frac{\Delta M_{dredge}}{\Delta M_{\mathrm{c}}}\,. \tag{7.12}$$
ΔM_{c} ist die Massezunahme des Kerns durch H-brennen seit dem letzten Puls. ΔM_{dredge} ist die Materiemenge aus der He-Schale, die in der Phase, in der die äußere Konvektionszone für kurze Zeit bis in die He-Schale hineinreicht, der äußeren Hülle beigemischt wird.
- Die chemische Zusammensetzung der Materie ΔM_{dredge}. Hierfür wird $X_{\mathrm{C}} = 0.22$, $X_{\mathrm{O}} = 0.02$, $X_{\mathrm{He}} = 0.76$ angenommen (Marigo et al. [1996]).

Die Materie in der He-Schale enthält nach dem Puls die Produkte des He-Brennens, die im Puls durch Konvenktion von der Unterkannte zur Oberkannte der He-Schale transportiert wurden, sowie die Produkte weiterer Nukleosynthese Prozesse, z.B. die *s*-Prozess-Elemente.

Durch den dritten dredge-up nach einem Puls ändern sich Kern- und Hüllenmasse wie folgt:

$$M_{\mathrm{c,neu}} = M_{\mathrm{c,alt}} - \lambda\Delta M_{\mathrm{c}} \tag{7.13}$$
$$M_{\mathrm{H,neu}} = M_{\mathrm{H,alt}} - \lambda\Delta M_{\mathrm{c}} \tag{7.14}$$

Nach jedem Puls werden die Kern und die Hüllenmasse auf diese Weise adjustiert und dann die Gln. (7.5) und (7.11) bis zum nächsten Puls gelöst. Die Elementhäufigkeiten in der Hülle müssen ebenfalls adjustiert werden:

$$X_{\mathrm{C,neu}} = (X_{\mathrm{C,alt}} M_{\mathrm{H}} + X_{\mathrm{C,He-Schale}}\, \lambda \Delta M_{\mathrm{c}})/(M\mathrm{H} + \lambda \Delta M_{\mathrm{c}}) \tag{7.15}$$

$$X_{\mathrm{O,neu}} = (X_{\mathrm{O,alt}} M_{\mathrm{H}} + X_{\mathrm{O,He-Schale}}\, \lambda \Delta M_{\mathrm{c}})/(M\mathrm{H} + \lambda \Delta M_{\mathrm{c}}) \tag{7.16}$$

7.9 Staubgetriebener Wind und Staubkondensation

Es wurden für verschiedene Elementhäufigkeiten und Sternparameter selbstkonsistente Windmodelle (siehe Kapitel 4) berechnet. Die Ergebnisse für die Kondensationsgrade für verschiedene Staubsorten werden durch einfache analytische Ausdrücke für M-, S- und C-Sterne genähert:

M-Sterne: Die Kondensationsgrade von Silikaten und Eisen lassen sich durch folgende Ausdrücke approximieren

$$f_{\mathrm{Sil}} = 0.8 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}} \sqrt{\frac{\epsilon_{\mathrm{crit}} - \epsilon_{\mathrm{C}}}{\epsilon_{\mathrm{crit}}}} \tag{7.17}$$

$$f_{\mathrm{Fe}} = 0.5 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}}\,, \tag{7.18}$$

wobei ϵ_{crit} die Kohlenstoffhäufigkeit für den Übergang von M- zu S-Sternen ist (siehe Kapitel 4).

S-Sterne: Die Kondensationsgrade von Eisen und SiC lassen sich durch folgende Ausdrücke approximieren

$$f_{\mathrm{Fe}} = 0.5 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}} \tag{7.19}$$

$$f_{\mathrm{SiC}} = 0.1 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}}\,. \tag{7.20}$$

C-Sterne: Die Kondensationsgrade von Eisen, SiC und Kohlenstoff lassen sich durch folgende Ausdrücke approximieren

$$f_{\mathrm{Fe}} = 0.5 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}} \tag{7.21}$$

$$f_{\mathrm{SiC}} = 0.5 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}} \tag{7.22}$$

$$f_{\mathrm{C}} = 0.5 \frac{\dot{M}}{\dot{M} + 5\,10^{-6}} \left(\frac{\epsilon_{\mathrm{C}} - \epsilon_{\mathrm{O}}}{\epsilon_{\mathrm{O}}}\right). \tag{7.23}$$

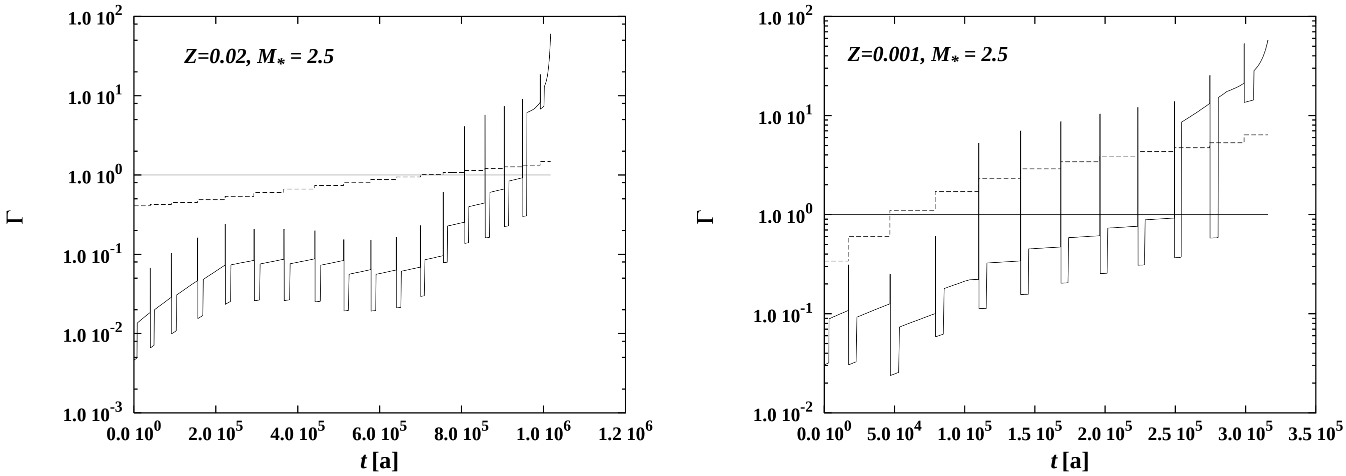

Abbildung 7.1 Entwicklung der Strahlungsbeschleunigung (durchgezogene Linie) der Staubhülle und Entwicklung des C/O-Häufigkeitsverhältnisses (gestrichelte Linie) für AGB-Sternmodelle mit $2.5M_\odot$ Anfangsmasse and Metallizitäten $Z = 0.001$ und $Z = 0.02$. Die Superwindphase beginnt in der Interpulsphase, wenn $\Gamma > 1$.

Die Massenverlustraten während der M-Stern-Phase von Silikat- und Eisen-Staub und der Gaskomponente sind

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Sil}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\ X_{\mathrm{Si}}\ \frac{A_{\mathrm{Si}}}{m_{\mathrm{Si}}}\ f_{\mathrm{Sil}} \tag{7.24}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\ X_{\mathrm{Fe}}\ \frac{A_{\mathrm{Fe}}}{m_{\mathrm{Fe}}}\ f_{\mathrm{Fe}} \tag{7.25}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Gas}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Sil}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t}\,. \tag{7.26}$$

Hier ist $\dot{M}$ die Massenverlustrate, X_{Si} und X_{Fe} die Elementhäufigkeiten (nach Masse) von Silizium und Eisen, A_{Si} und A_{Fe} die Molekulargewichte der Silizium und Eisen Kondensate, und m_{Si} und m_{Fe} die Atomgewichte von Si und Fe.

Die Massenverlustraten während der S-Stern-Phase von SiC und Eisen-Staub und der Gaskomponente sind

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{SiC}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\ X_{\mathrm{Si}}\ \frac{A_{\mathrm{Si}}}{m_{\mathrm{Si}}}\ f_{\mathrm{SiC}} \tag{7.27}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\ X_{\mathrm{Fe}}\ \frac{A_{\mathrm{Fe}}}{m_{\mathrm{Fe}}}\ f_{\mathrm{Fe}} \tag{7.28}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Gas}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{SiC}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} \tag{7.29}$$

Die Bedeutung der einzelnen Termen ist wie im Fall der M-Sterne.

Die Massenverlustraten während der C-Stern-Phase von SiC, Eisen- und Kohlenstoff-Staub und der Gaskomponente sind

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{SiC}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\ X_{\mathrm{Si}}\ \frac{A_{\mathrm{Si}}}{m_{\mathrm{Si}}}\ f_{\mathrm{SiC}} \tag{7.30}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\; X_{\mathrm{Fe}}\; \frac{A_{\mathrm{Fe}}}{m_{\mathrm{Fe}}}\; f_{\mathrm{Fe}} \tag{7.31}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{C}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M}\; X_{\mathrm{C}}\; \frac{A_{\mathrm{C}}}{m_{\mathrm{C}}}\; f_{\mathrm{C}} \tag{7.32}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Gas}}}{\mathrm{d}t} = \dot{M} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{SiC}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}M_{\mathrm{C}}}{\mathrm{d}t} \tag{7.33}$$

Die Bedeutung der einzelnen Termen ist ebenfalls wie im Fall der M-Sterne.

Diese Approximationen werden in der synthetischen AGB-Rechnung verwendet. Zunächst wird mit den Approximationen für die Kondensationsgrade das Verhältnis von Strahlungs- zur Schwerbeschleunigung (siehe Kapitel 3) berechnet.

$$\Gamma = \frac{L}{4\pi\, c\, G M} \sum_i f_i \,\langle\kappa'\rangle_{\mathrm{H,i}} \tag{7.34}$$

Die f_i sind die Kondensationsgrade für die Staubsorten und κ_i die entsprechenden Absorptionskoeffizienten, wie sie im Kapitel 3 gegeben sind. Wenn $\Gamma > 1$ ist, dann reicht der Strahlungsdruck auf Staub aus, um der Sternwind anzutreiben. Dies entspricht der Superwindphase am Ende des AGB. Die Massenverslustrate $\dot{M}$ wird dann nach Gln. (7.9) berechnet. Wenn $\Gamma < 1$ ist, wird die Massenverlustrate nach der Reimers Formel

$$\dot{M} = \eta\, 4\, 10^{-13} \frac{L\, R}{M} \tag{7.35}$$

mit $\eta = 0.86$ (Groenewegen & de Jong [1994]) berechnet. Alternativ könnte auch die Gleichung (7.8) verwendet werden, aber auf dem unteren Ende des AGB vor der Superwindphase scheint die Reimersformel realistischere Werte zu liefern.

Mit der Massenverlustrate $\dot{M}$ werden die Massenverlustraten der einzelnen Staubspezies nach den obigen Gleichungen berechnet.

Die Abbildung (7.1) zeigt als Beispiel für die Ergebnisse der synthetischen AGB-Entwicklungsmodelle für ein Sternmodell mit $2.5 M_\odot$ Anfangsmasse und Metallizitäten $Z = 0.001$ und $Z = 0.02$ die Entwicklung der Strahlungsbeschleunigung Γ und die Entwicklung des C/O-Häufigkeitsverhälnisses. Der Nullpunkt der Zeitskala ist der erste thermische Puls. Die einzelnen thermischen Pulse markieren sich in der Abbildung durch einen kurzfristigen Anstieg und ein anschliessendes, kurzes Minimum von Γ, das durch eine entsprechende Variation von L hervorgerufen wird. Die Superwindphase, in der die Massenverlustrate dramatisch ansteigt, beginnt, wenn $\Gamma > 1$ geworden ist.

Für das Modell mit $Z = 0.001$ übersteigt das C/O-Häufigkeitverhältnis schon nach einigen Pulsen die kritische Grenze C/O=1 und der Stern wird zum Kohlenstoffstern. Nach einigen weiteren Pulsen überschreitet Γ den kritischen Wert $\Gamma = 1$ und die Superwindphase beginnt. Nach weiteren zwei Pulsen hat der Stern seine ganze äußere Hülle verloren. In den Modell mit $Z = 0.02$ sind erst eine großen Anzahl von Pulsen erforderlich, um das C/O-Häufigkeitverhältnis auf eins ansteigen zu lassen, da wegen der größeren Metallizität von vorneherein mehr Kohlenstoff und Sauerstoff in der Hülle enthalten sind. Ab dem Punkt $\Gamma > 1$ ist die weitere Entwicklung ähnlich wie beim Modell mit $Z = 0.001$.

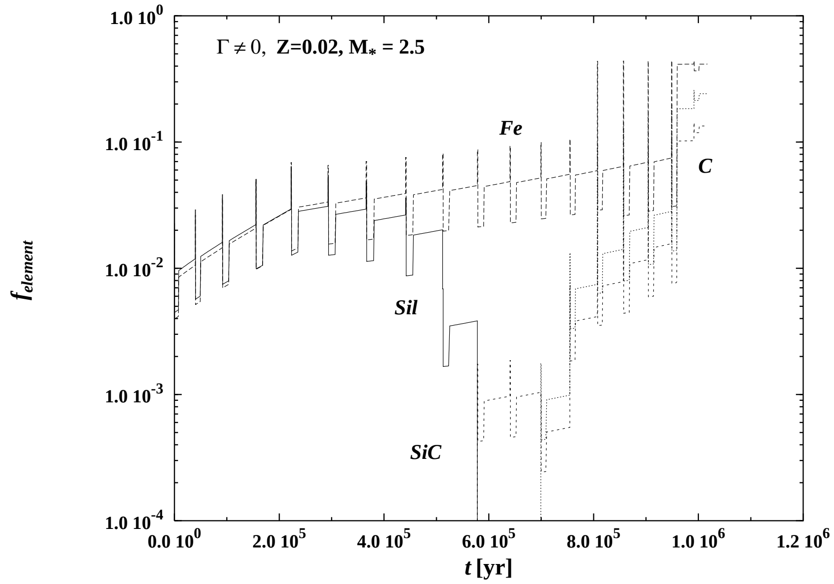

Abbildung 7.2 Zeitabhängige Kondensationsgrade der unterschiedlichen Staubspezies (durgezogen: Silikat, gestrichelt: SiC, gepunktet: Kohlenstoff) während der AGB-Entwicklung für ein Modell mit $2.5 M_\odot$ Anfangsmasse und einer Metallizität von $Z = 0.02$.

Die Abbildung (7.2) zeigt die Entwicklung der Kondensationsgrade für die unterschiedlichen Staubspezies mit einer Metallizität von $Z = 0.02$. In der ersten Phase der Entwicklung auf dem TP-AGB ist der Stern ein M-Stern und produziert Silikat- und Eisen-Staub. Es ist deutlich zu erkennen wie die Silikatproduktion endet, wenn das C/O-Verhältnis sich dem Wert eins annähert und der Stern zum S-Stern wird. Solange C/O etwa eins ist, werden nur Eisenstaub und minimale Mengen an SiC prodiziert. Sobald C/O>1 wird, beginnt die massive Kohlenstoffstaubproduktion, die auch dafür verantwortlich ist, dass $\Gamma > 1$ wird.

7.10 Ergebnisse für die Staubproduktion in AGB-Sternen

Die Abbildung (7.3) zeigt als Beispiel für die Ergebnisse der synthetischen AGB-Entwicklungsmodelle für ein Sternmodell mit $2.5 M_\odot$ Anfangsmasse und Metallizitäten $Z = 0.001$ und $Z = 0.02$ die über die Zeit integrierte Staubproduktion. In der M-Stern-Phase ist der Stern bei der Metallizität $Z = 0.02$ ein ergiebiger Produzent für Silikat- und Eisenstaub, während er als metallarmer Stern mit $Z = 0.001$ praktisch keinen Staub produziert. In der S-Stern-Phase werden bei beiden Metallizitäten etwa die gleiche Eisen und SiC Staubmenge produziert. Auch in der C-Stern-Phase verläuft die Entwicklung in beiden Fällen annähernd gleich, und es werden etwa gleich große Mengen an Eisen, SiC und Kohlenstoffstaub produziert. Das liegt hauptsächlich daran, dass der Kohlenstoff im Stern selbst produziert wird, und dadurch die zur Kondensation zur Verfügung stehende Menge an Kohlenstoff nicht von der Metallizität des Sterns abhängt. Die Ergebnisse von Modellrechnungen für den Bereich der Sternmassen von 1 bis 7 $M_\odot$ für AGB-Sterne sind in den Tabellen 7.2 und 7.1 für die Metallizitäten $Z = 0.02$ und $Z = 0.001$ zusammenge-

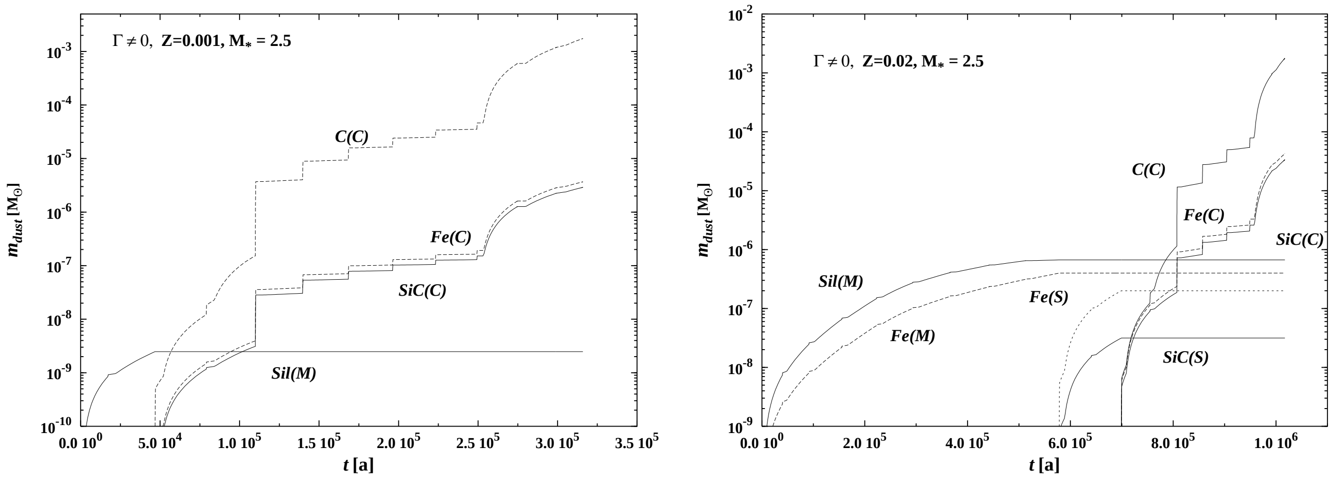

Abbildung 7.3 Zeitlich integrierte Staubproduktion für AGB-Sternmodelle mit $2.5M_\odot$ Anfangsmasse und Metallizitäten $Z = 0.001$ und $Z = 0.02$. Die Abbildungen zeigen die bis zum Zeitpunkt t ausgeworfene Staubmasse während der M-, S-, und C-Stern-Phase.

fasst. Sie geben die Anzahl der Pulse, die Lebensdauer auf dem TP-AGB und die produzierten Staubmengen in $M_\odot$ an. Diese Ergebnisse können verwendet werden, um zukünftig die Staubinjektionsrate der AGB-Sterne in das ISM im Rahmen von Entwicklungsmodellen für die chemischen Entwicklung von Galaxien zu berechnen.

Tabelle 7.1: Anzahl der Pulse, Lebensdauer auf dem TP-AGB und produzierte Staubmengen in $M_\odot$ für unterschiedliche Sternmassen und eine Metallizität von $Z = 0.02$.

$M_\odot$	np	t	Silikate	Fe	SiC	C
1.0	5	$2.40207\,10^{5}$	$5.44659\,10^{-7}$	$4.74591\,10^{-6}$	$3.48718\,10^{-6}$	$2.08395\,10^{-4}$
1.25	7	$3.94729\,10^{5}$	$7.74615\,10^{-7}$	$1.09669\,10^{-5}$	$8.09155\,10^{-6}$	$3.59549\,10^{-4}$
1.5	9	$5.55833\,10^{5}$	$9.41224\,10^{-7}$	$1.64023\,10^{-5}$	$1.21356\,10^{-5}$	$5.58952\,10^{-4}$
1.7	10	$6.42928\,10^{5}$	$9.98666\,10^{-7}$	$2.27740\,10^{-5}$	$1.72481\,10^{-5}$	$5.06626\,10^{-4}$
2.0	14	$8.15240\,10^{5}$	$8.93388\,10^{-7}$	$2.98396\,10^{-5}$	$2.29836\,10^{-5}$	$1.22901\,10^{-3}$
2.5	18	$1.01723\,10^{6}$	$6.67703\,10^{-7}$	$4.30658\,10^{-5}$	$3.35542\,10^{-5}$	$1.76761\,10^{-3}$
3.0	23	$1.17571\,10^{6}$	$5.44450\,10^{-7}$	$5.56671\,10^{-5}$	$4.35627\,10^{-5}$	$2.66787\,10^{-3}$
4.0	80	$4.72551\,10^{5}$	$3.30848\,10^{-6}$	$8.52641\,10^{-5}$	$6.53014\,10^{-5}$	$1.77497\,10^{-3}$
5.0	274	$5.62201\,10^{5}$	$4.72038\,10^{-4}$	$1.10574\,10^{-4}$	.00000	.00000
7.0	823	$4.86467\,10^{5}$	$7.48173\,10^{-4}$	$1.73450\,10^{-4}$	.00000	.00000

Tabelle 7.2: Anzahl der Pulse, Lebensdauer auf dem TP-AGB und produzierte Staubmengen in $M_\odot$ für unterschiedliche Sternmassen und eine Metallizität von $Z = 0.001$.

$M_\odot$	np	t	Silikate	Fe	SiC	C
1.0	4	$6.63137\,10^{5}$	$3.43310\,10^{-9}$	$5.84807\,10^{-7}$	$4.61023\,10^{-7}$	$3.00681\,10^{-4}$
1.25	4	$4.80371\,10^{5}$	$2.15817\,10^{-10}$	$1.05223\,10^{-6}$	$8.30556\,10^{-7}$	$6.82438\,10^{-4}$
1.5	5	$4.30257\,10^{5}$	$2.06667\,10^{-10}$	$1.56712\,10^{-6}$	$1.23701\,10^{-6}$	$9.66046\,10^{-4}$
1.7	6	$4.19365\,10^{5}$	$2.82209\,10^{-10}$	$1.96808\,10^{-6}$	$1.55350\,10^{-6}$	$1.17304\,10^{-3}$
2.0	8	$3.58481\,10^{5}$	$4.37415\,10^{-10}$	$2.50211\,10^{-6}$	$1.97475\,10^{-6}$	$1.43775\,10^{-3}$
2.5	12	$3.15937\,10^{5}$	$2.48298\,10^{-9}$	$3.67347\,10^{-6}$	$2.89900\,10^{-6}$	$1.73840\,10^{-3}$
3.0	20	$2.65961\,10^{5}$	$3.58104\,10^{-9}$	$4.88197\,10^{-6}$	$3.85226\,10^{-6}$	$2.07826\,10^{-3}$
4.0	44	$2.53061\,10^{5}$	$6.49567\,10^{-9}$	$7.18025\,10^{-6}$	$5.66483\,10^{-6}$	$2.83139\,10^{-3}$
5.0	542	$7.95404\,10^{5}$	$2.42012\,10^{-5}$	$8.18420\,10^{-6}$	$1.04955\,10^{-6}$	$1.54495\,10^{-4}$
7.0	1632	$6.53452\,10^{5}$	$4.25653\,10^{-5}$	$1.30971\,10^{-5}$	$1.47231\,10^{-6}$	$2.09869\,10^{-4}$

A. Extinktion der Staubteilchen

Die Extinktions-Effizienzen Q_{abs}, Q_{sca} der Staubteilchen sind aus der Mie Theorie für sphärische Teilchen berechnet (Bohren & Huffman [1983]). Die benötigten optischen Konstanten n und k sind aus einer analytischen Anpassung experimenteller Daten für optische Eigenschaften verschiedener Materialien berechnet.

Die komplexe Dielektrizitätskonstante ϵ des Staubmaterials ist mit dem Drude-Lorentz-Modell gefittet. Dieses Modell beschreibt die Variation der $\epsilon(\omega)$ mit der Frequenz ω als Superposition einer Anzahl von Lorentz-Profilen,

$$\epsilon(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\gamma\omega} \tag{A.1}$$

die sich aus dem Modell mit gedämpften Oszillatoren mit der Rezonanzfrequenz ω_0 und konstanter Dämpfung γ ergeben.

In Fall elektrisch leitender Materialien kann der Beitrag der Ladungsträger zur komplexen Dielektrizitätskonstante durch das Drude-Lorentz-Modell als

$$\epsilon(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega} \tag{A.2}$$

dargestellt werden. Die Plasmafrequenz ω_p ist gegeben durch

$$\omega_p = \frac{4\pi e^2}{m} n_{\mathrm{e}}\,, \tag{A.3}$$

wobei m die Masse der Ladungsträger (Elektronen, Löcher) und n_{e} die Elektronen/Löcher-dichte ist. γ ist der reziproke Wert der mittleren Kollisionszeit der Ladungsträger. Im Rahmen des Drude-Lorentz-Modells ist dies mit der elektrischen Leitfähigkeit σ des Materials durch

$$\sigma = \frac{\omega_p^2}{4\pi\gamma}\,. \tag{A.4}$$

verbunden.

Die dielektrische Konstante im Drude-Lorentz-Modell ist gegeben durch

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 - \sum_j \frac{\omega_{pj}^2}{\omega^2 - \omega_{0j}^2 + i\gamma_j\omega} \tag{A.5}$$

Tabelle A.1: Parameter aus dem Drude-Lorentz-Modell für die optische Konstante für einige Staubmaterialien

ϵ_0	ω_j	ω_{pj}	γ_j
		SiC	
1	$1.494\,10^{14}$	$2.712\,10^{14}$	$1.488\,10^{13}$
	$1.991\,10^{14}$	$2.247\,10^{14}$	$4.092\,10^{14}$
	$2.045\,10^{16}$	$1.076\,10^{16}$	$1.746\,10^{15}$
	$1.752\,10^{16}$	$1.418\,10^{16}$	$4.627\,10^{15}$
		Fe	
1	0	$1.175\,10^{16}$	$2.853\,10^{15}$
	0	$4.648\,10^{15}$	$2.667\,10^{13}$
	$3.752\,10^{15}$	$1.155\,10^{16}$	$3.761\,10^{15}$
	$1.741\,10^{16}$	$3.105\,10^{16}$	$4.249\,10^{16}$
		FeSi	
2.212	0	$8.374\,10^{15}$	$3.852\,10^{15}$
	$8.780\,10^{11}$	$9.807\,10^{14}$	$1.001\,10^{14}$
	$2.045\,10^{14}$	$5.211\,10^{14}$	$1.148\,10^{14}$
	$1.383\,10^{15}$	$2.003\,10^{15}$	$1.177\,10^{15}$
	$3.643\,10^{15}$	$7.158\,10^{15}$	$3.958\,10^{15}$
	$5.664\,10^{15}$	$1.711\,10^{16}$	$2.383\,10^{16}$
	$6.684\,10^{15}$	$7.735\,10^{15}$	$3.945\,10^{15}$
	$1.065\,10^{16}$	$3.109\,10^{15}$	$1.513\,10^{15}$
	$1.461\,10^{16}$	$4.953\,10^{15}$	$4.304\,10^{15}$
	$1.863\,10^{16}$	$8.788\,10^{15}$	$4.589\,10^{15}$

(Bohren & Huffman [1983]). Die Konstante ϵ_0 ist gleich eins, falls alle Oszillatoren im Modell berücksichtig sind. Werte von ϵ_0 ungleich eins werden benötigt, wenn die Oszillatoren in fernen UV nicht explizit berücksichtigt worden sind, nur im Niederfrequenzgrenzfall sind Beiträge ω_p^2/ω_0^2 (siehe A.1) einbezogen. Das Modell (A.5) erfüllt automatisch die Kramers-Kronig-Relation.

Die Konstanten ϵ_0, ω_{pj}, ω_{0j}, und γ_j wurden aus analytischer Anpassung experimenteller Daten bestimmt. Die Tabelle A.1 zeigt die Ergebnisse für die Koeffizienten für das Modell (A.5) aus experimentellen Daten für einige Staubmaterialien. Die Anpassung wurde mit der Option`fit` der Gnuplot Software durchgeführt. Für die optische Konstante SiC wurden die Werte aus Laor & Draine [1993] benutzt. Die Daten von Fe wurden Lide [1995] und Pollak et al. [1994] entnommen.

Für FeSi wurde die optische Reflektivität aus Daten von Degiorgi et al. [1994] benutzt, das Drude-Lorentz-Modell (A.5) ist mit der Beziehung zwischen der optischen Reflektivität und der dielektrischen Koeffizienten gefittet (Bohren & Huffman [1983]). Für die Berechnung in dieser Arbeit wurden die Raumtemperatur Daten verwendet, ($T = 300\,\mathrm{K}$ in Degiorgi et al. [1994]) da die infrarot Emission des Staubs aus der Hüllen der AGB-Sterne durch warmen Staub emittiert wird. Das ist für FeSi-

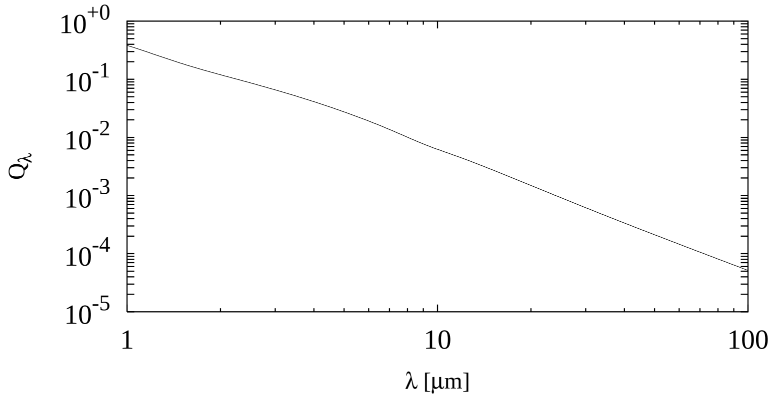

Abbildung A.1 Extinktion Effizienz Q_λ für FeSi für 0.1 μm Staubteilchen.

Material besonders wichtig, weil die optischen Eigenschaften bei niedriger Temperatur ganz anders als bei hoher Temperatur sind. Bei einer Temperatur von $T \gtrsim 200\,\mathrm{K}$ verhält sich das Material wie ein Metall, bei niedriger Temperatur wie ein Isolator. Die starke Temperaturabhängigkeit der Eigenschaften von FeSi ist in Abb. 3 in Ferrarotti et al. [2000] zu sehen. Die Fit-Ergebnisse der optischen Reflektivität bei Hochtemperatur sind in Tab. A.1 aufgezeigt. Die berechnete Absorptions-Effizienz Q_λ für sphärische Staubteilchen mit Radius von 0.1 μm ist in Abb. A.1 als Beispiel zu sehen.

B. Thermodynamische Daten für Fe-Si-Verbindungen

Für FeSi- und NiSi-Moleküle ist die freie Enthapie für die Bildung aus freien Atomen mit Hilfe von Formeln aus der statistische Mechanik für c_p und S (siehe Einführung in JANAF-Tabelle, Chase et al. [1985]) berechnet. Die molekularen Daten (Dissoziationsenergie, Bindungslänge, Schwingungsfrequenz) wurden aus der Arbeit von vander Auwera-Mahieu, McIntyre & Drowart [1969] entnommen.

Die Temperaturabhängigkeit von ΔG wurde mit einem Polynom der Form

$$\Delta G(T) = \frac{a}{T} + b + cT + dT^2 + eT^3\,, \tag{B.1}$$

nach Sharp & Huebner [1990] angepasst. Die Koeffizienten $a, \ldots, e$ sind in Tab. B.1 aufgelistet. Die thermodynamischen Daten für die Fe-, Ni-, und Si-Festkörper sind aus Barin [1992] entnommen. Die freie Enthalpie für die Bildung aus freien Atomen wurde wieder mit einem Polynom der Form (B.1) angepasst. Die Ergebnisse sind in Tab. B.1 zu sehen.

Tabelle B.1: Polynom-Koeffizienten für die Berechnung der freien Enthalpie für die Bildung aus freien Atome von FeSi- und NiSi-Molekülen und einige Fe-, Ni-, und Si-Verbindungen. Die Einheit für ΔG ist Kcal/Mol und der Druck ist in bar.

Verbindung	Phase	a	b	c	d	e
FeSi	gas	$3.28729\,10^{6}$	$-8.78894\,10^{4}$	$5.44736\,10^{1}$	$-1.59335\,10^{-2}$	$3.54848\,10^{-6}$
NiSi	gas	$6.38287\,10^{6}$	$-1.07255\,10^{5}$	$2.02338\,10^{2}$	$-5.46060\,10^{-3}$	$2.39700\,10^{-6}$
FeSi	sol	$1.28292\,10^{5}$	$-2.26646\,10^{5}$	$7.49195\,10^{1}$	$-1.68879\,10^{-3}$	$-1.44677\,10^{-7}$
$FeSi_2$	sol	$1.19491\,10^{4}$	$-3.34623\,10^{5}$	$1.11840\,10^{2}$	$-4.23977\,10^{-4}$	$-7.70794\,10^{-7}$
NiSi	sol	$3.31257\,10^{4}$	$-2.31096\,10^{5}$	$7.38113\,10^{1}$	$-1.63917\,10^{-3}$	$1.41709\,10^{-7}$
Ni_7Si_{13}	sol	$4.71476\,10^{5}$	$-2.26229\,10^{6}$	$7.38716\,10^{2}$	$-1.94029\,10^{-2}$	$1.69815\,10^{-6}$

C. Extinktion kleiner Würfel

Die Extinktion kleiner Würfel wurde bei Fuchs [1975] berechnet. Die dielektrische Polarisierbarkeit eines Würfel mit Volumen V ist

$$\alpha = V \sum_m \frac{C_m}{n_m} \frac{\epsilon - 1}{\epsilon - 1 + n_m^{-1}} , \tag{C.1}$$

wobei ϵ die komplexe dielektrische Konstante ist. Der Faktor 4π wurde in der Gleichung (1) von Fuchs eingeführt, um mit der Definition von α von Bohren & Huffman [1983] übereinzustimmen. Die Konstanten C_m und n_m sind in Tab. C.1 gegeben. Die Absorptions- und Streuquerschnitte kleiner, würfelförmiger Staubteilchen sind (Bohren & Huffman [1983])

$$\sigma_\lambda^{\mathrm{abs}} = \frac{2\pi}{\lambda} \Im m \, \alpha \tag{C.2}$$

$$\sigma_\lambda^{\mathrm{sca}} = \frac{128\,\pi^3}{3\lambda^4} \, |\alpha|^2 \, . \tag{C.3}$$

Die Abbildung (C.1) zeigt den Absorptionsquerschnitt von Magnesium im Bereich der starken Resonanz bei ca. $19\,\mu$m von Magnesiumwüstit mit der Zusammensetzung $Mg_{0.6}Fe_{0.4}O$, berechnet mit den optischen Daten von Henning et al. [1995]. Für Würfel ist die Resonanzspitze verglichen mit Kugeln zu längerer Wellenlänge verschoben.

Tabelle C.1: Koeffizienten C_m, n_m für würfelförmige Teilchen nach Fuchs [1975].

m	1	2	3	4	5	6
C_m	0.44	0.24	0.04	0.05	0.10	0.09
n_m	0.214	0.297	0.345	0.440	0.563	0.706

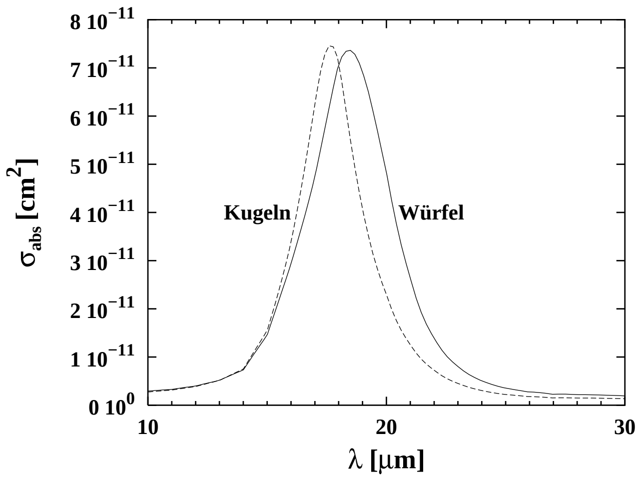

Abbildung C.1 Absorptionsquerschnitt von $Mg_{0.6}Fe_{0.4}O$ für kleine Sphären mit Radius $a = 0.1\,\mu$m und für Würfel mit gleichem Volumen.

Literaturverzeichnis

[1988] Aitken, D.K., Smith, C.H., James, S.D., Roche, P.F., & Hough, J.H. 1988, MNRAS, 230, 629

[1989] Anders, E., & Grevesse, N., 1989, Geochim. et Cosmochim. Acta, 53, 197

[1994] Atkins P. W., 1994, Physical Chemistry. 5th. Ed. (Oxford University Press)

[1992] Barin, I., 1992, Thermodynamical Data of Pure Substances, Verlag Chemie, Weinheim

[1992] Beck, H.K.B., Gail, H.-P., Henkel, R., & Sedlmayr E., 1992, A&A, 265, 626

[1994] Bell, K.R., & Lin, D.N.C., 1994, ApJ, 427, 987

[1996] Bernatowicz, T.J., Cowsik R., Gibbons P.C., et al., 1996, ApJ, 472, 760

[1994] Bieging, J.H., Latter, W.B., 1994, ApJ, 422, 765

[1996] Binnewies M., 1996, Chemische Gleichgewichte. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim

[1983] Bohren, C.F., & Huffman, D.R., 1983, Absorption and Scattering of Light by Small Particles, John Wiley & Sons, New York

[1999] Boothroyd, A.I., & Sackman, I.-J., 1999, ApJ, 510, 232

[1992] Brewster M.Q., 1992, Thermal Radiative Transfer and Properties, John Wiley & Sons, New York etc.

[1999] Busso, M., Gallino, R., & Wasserburg ,G.J., 1999, ARAA, 37, 239

[1985] Chase, Jr. M.W., Davies, C.A., Downey, Jr. J.R., et al., 1985, JANAF Thermodynamic Tables, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg

[1998] Chang C., Patzer A.B.C., Sedlmayr E., Sülzle D., 1998, Eur. Phys. J. D2, 57

[1993] Chen, P.S., & Kwok, S., 1993, ApJ, 416, 769

[2000] Chen Y.Q., Nissen P.E., Zhao G., Zhang H.W., Benoni T., 2000, A&AS 141, 491

[1998] Cherchneff, I., 1998, in The Molecular Astrophysics of Stars and Galaxies, eds. T.W. Hartquist, D.A. Williams (Clarendon Press, Oxford), 265

[1999] Chigai, T., Yamamoto, T., & Kozasa, T., 1999, ApJ, 510, 999

[1994] Degiorgi, L., Hunt, M.B., Ott, H.R., et al., 1994, Europhys. Lett. 28, 341

[1978] Donn B., 1978, In: T. Gehrels (ed.) Protostars & Planets I. University of Arizona Press, Tucson. p. 100

[1995] Dorschner J., Begemann B., Henning T., Jaeger C., Mutschke H., 1995, A&A 300, 503

[1985] Draine B. T., 1985, Tabulated optical properties of graphite and silicate grains. ApJS, 57, 587

[2000] Ebel, D.S., & Grossman, L., 2000, Geochim. et Cosmochim. Acta, 64, 339

[1993] Edwardsson, B., Andersen, J., Gustafsson, B., et al., 1993, A&A, 275, 101

[1994] Fegley, B., & Lodders, K., 1994, Icarus, 110, 117

[2000] Ferrarotti, A., Gail, H.-P., Degiorgi, L., & Ott, H.R., 2000, A&A, 357, L13

[2001] Ferrarotti, A.S., & Gail, H.-P., 2001, A&A, 371, 133 (paper II)

[2002] Ferrarotti, A.S., & Gail, H.-P., 2002, A&A, 382, 256 (paper III)

[2003] Ferrarotti, A.S., & Gail, H.-P., 2003, A&A, 398, 1029 (paper IV)

[1997] Forestini M., Charbonnel C., 1997, A&AS, 123, 241

[1975] Fuchs, R., 1975, Phys. Rev. B 11, 1732

[1986] Gail H.-P., Sedlmayr E., 1986, A&A, 166, 225

[1987] Gail H.-P., Sedlmayr E., 1987, A&A, 171, 197

[1998a] Gail, H.-P., & Sedlmayr, E., 1998a, in The Molecular Astrophysics of Stars and Galaxies, eds. T.W. Hartquist, D.A. Williams (Clarendon Press, Oxford), 287

[1998a] Gail, H.-P., 1998, A&A, 332, 1099

[1998b] Gail, H.-P., & Sedlmayr, E., 1998b, Faraday Discussion, 109, 303

[1998] Gail H.-P., 1998, A&A, 332, 1099

[1999] Gail, H.-P., & Sedlmayr, E., 1999, A&A, 347, 594 (paper I)

[1995] Gautschy, A., & Saio, H., 1995, ARA&A, 33, 75

[1969] Gilman, R.C., 1969, ApJ, 155, L185

[1996] Glassgold, A.E., 1996, ARA&A 34, 241

[1992] Golub G.H., Ortega J.M., 1992, Scientific Computing and Differential Equations, Academic Press, Boston etc.

[1988] Gratton R.G., Sneden C., 1988, A&A, 204, 193

[1993] Grevesse, N., & Noels, A., 1993, in Origin and Evolution of the Elements, eds. Prantzos N., Vangioni-Flam E., Cassé M. (Cambridge University Press, Cambridge), 15

[1998] Groenewegen, M.A.T., & de Jong, T., 1998, A&A, 337, 797

[1995] Groenewegen, M.A.T. , van den Hoek, & L.B., de Jong, T., 1995, A&A, 293, 381

[1994] Groenewegen, M.A.T.,de Jong, T., 1994, A&A, 282, 127

[1992] Groenewegen, M.A.T.,de Jong, T., 1992, A&A, 267, 410

[1972] Grossman, L., 1972, Geochim. et Cosmochim. Acta, 36, 597

[1996] Habing, H.J., 1996, A&AR 7, 97

[1990] Hashimoto A., 1990, Nature 347, 53

[1995] Henning, Th., Begemann, B., Mutschke, H., & Dorschner J., 1995, A&AS, 112, 143

[1997] Henning Th., Mutschke H., 1997, A&A, 327, 743

[2000] von Helden, G., Tielens, A.G.G.M., van Heijnsbergen, D., et al., 2000, Sci 288, 313

[1991] Iben, Jr. I., 1991, ApJS ,76, 55

[1993] Imae N., Tsuchijama A., Kitamura M., 1993, Earth & Planetary Sci. Lett. 118, 21

[1988] de Jager, C., Nieuwenhuijzen, H., & van der Hucht, K.A., 1988, A&AS, 72, 259

[1987] Jaschek, C., & Jaschek, M., 1987, The classification of stars, Cambridge University Press, Cambridge etc.

[2000] Jeong, K.S., 2000, Dust Shells around oxygen-rich Miras and Long-Period Variables. Thesis, Technical University, Berlin

[1998] Jorissen A., Knapp G.R., 1998, A&AS, 129, 363

[1993] Jorissen, A., Frayer, D.T., Johnson, H.R., Mayor, M., & Smith, V.V., 1993, A&A, 271, 463

[1988] Jura, M., 1988, ApJS, 66, 33

[1996] Jura, M., 1996, ApJ, 472, 806

[1999] Kerschbaum, F., 1999, A&A, 351, 627

[1996] Kerschbaum, F., & Hron, J., 1996, A&A, 308, 489

[1996] Kozasa, T., Dorschner, J., Henning, T., & Stognienko, R., 1996, A&A, 307, 551

[1997] Köhler, T.M., Gail, H.-P., & Sedlmayr, E., 1997, A&A, 320, 553

[1985] Knapp G.R., 1985, ApJ, 293, 273

[1983] Kubaschewski, O., & Alcock, C.B., 1983, Metallurgical Thermochemistry, 5^{th} Ed., Pergamon Press, Oxford

[1963] Laidler K. J., 1963, Reaction Kinetics. Pergamon Press.

[1968] Landolt-Börnstein, 1968, Zahlenwerte und Funktionen Vol. 5b, K. Schäfer Ed., Springer Verlag, Heidelberg

[1992] Lang K.R., 1992, Astrophysical Data, Planets and Stars. Springer, New York etc.

[1993] Laor, A., & Draine, B.T., 1993, ApJ, 402, 441

[1999] Lattanzio, J., & Forestini, M., 1999, In: Asymptotic Giant Branch Stars, eds. T. Le Bertre, A. Lèbre, C. Waelkens. IAU Symposium 191, p. 31

[1978] Lattimer, J.M. , Schramm, D.N., & Grossman, L., 1978, ApJ, 219, 230

[1998] Le Bertre T., Winters J.M., 1998, A&A, 334, 173

[1995] Lide, R.D., 1995, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 76th ed., CRC Press, Boca Raton etc.

[1984] Lloyd Evans, T., 1984, MNRS, 204, 985

[1999] Lloyd Evans, T., & Little-Marenin, I.R., 1999, MNRAS, 304, 421

[1995] Lodders, K., & Fegley, Jr. B., 1995, Meteoritics 30, 661

[1997] Lodders, K., & Fegley, Jr. B., 1997, in Astrophysical Implications of the Laboratory Study of Presolar Material, eds. T. J. Bernatovicz, E.K. Zinner. American Instit. of Phys., AIP Conf. Proc. 402, p. 391

[1999] Lodders K., & Fegley Jr. B., 1999, in: Asymptotic Giant Stars, eds T. Le Bertre, A. Lébre, C. Waelkens. IAU Symp. 191, p. 279

[1993] Loup C., Forveille T., Omont A., & Paul J.F., 1993, A&AS, 99, 291

[1971] Lucy L.B., 1971, ApJ, 163, 95

[1976] Lucy L.B., 1976, ApJ, 205, 482

[1988] Maeder A., & Meynet G., 1988, A&AS, 76, 411

[1989] Maeder A. und Meynet G., 1989, A&A, 210, 155

[1987] Magain P., 1987, A&A, 179, 176

[1996] Marigo P., Bressan A., Chiosi C., 1996, A&A, 313, 545

[1977] Mathis J.S., Rumpl W., Nordsieck K. H., 1977, AJ, 217, 425

[1983] Mathis J.S., Mezger P.G., Panagia N., 1983, A&A, 128, 212

[1998] Mendybaev R.A., Beckett J.R., Grossman L., Stolper E., 1998, Lunar and Planetary Science Conference, 29, 1871

[1978] Mihalas D., 1978, Stellar Atmospheres 2ndEd. Freeman, San Francisco

[1999] Molster F.J., Waters L.B.F.M., Trams N.R. et al., 1999, A&A, 350, 163

[2000] Molster. F.J., 2000, Thesis, University of Amsterdam

[2002a] Molster F.J., Waters L.B.F.M., Tielens A.G.G.M., & Barlow, M.J. 2002a, A&A, 382, 184

[2002b] Molster F.J., Waters L.B.F.M., & Tielens A.G.G.M. 2002b, A&A, 382, 222

[2002c] Molster F.J., Waters L.B.F.M., Tielens A.G.G.M., Koike, C., & Chihara, H. 2002c, A&A, 382, 241

[1983] Moore W., Hummel D., 1983, Physikalische Chemie.

[1996] Nagahara H., & Ozawa K., 1996, Geochim. et Cosmochim. Acta, 60, 1445

[2002] Olofsson H., Gonzàlez Delgado D., Kerschbaum F, & Schöier F.L., 2002, A&A, 391, 1053

[1989] Onaka T., de Jong T., & Willems F.J. 1989, A&A, 218, 169

[1988] Pégourié B.,1988, Optical properties of alpha silicon carbide. A&A, 194, 335

[1990] Philpotts A.R., 1990, Principles of igneous and metamorphic petrology. Prentice Hall, Englewood Cliffs

[1994] Pollack J.B., Hollenbach D., Beckwith S., et al., 1994, ApJ, 421, 615

[2002] Posch T., Kerschbaum F., Mutschke H., Dorschner J., & Jäger C., 2002, A&A, 393, L7

[1995] Putnis A., 1995, Introduction to mineral science. Cambridge University Press, Cambridge

[1974] Rickert H., & Weppner W., 1974, Z. Naturforsch. 29a, 1849

[1992] Rietmeijer F.J.M., 1992, ApJL, 400, L39

[1999a] Rietmeijer F.J.M., Nuth III J.A., & Karner J.M. 1999a, ApJ, 527, 395

[1999b] Rietmeijer F.J.M., Nuth III J.A., & Karner J.M. 1999b, Phys. Chem. Chem. Phys. 1, 1511

[2002] Rietmeijer F.J.M., Hallenbeck S.L., Nuth III J.A., & Karner J.M. 2002, Icarus 156, 269

[1999] Råback P., 1999, Modeling of Sublimation Growth of Silicon Carbide Crystals. Dissertation Helsinki University of Technology. ISBN 952-9821-54-9

[1995] Sahai R., & Liechti S., 1995, A&A, 293, 198

[1986] Saxena S.K., & Eriksson G., 1986, in Chemistry and Physics of Terrestrial Planets, ed. Saxena, S. K. Springer, New York etc., p. 30

[1974] Scalo J.M., 1974, ApJ ,194, 361

[1976] Scalo J.M., & Ross J.E., 1976, A&A, 48, 219

[1992] Schaller G., Schaerer D., Meynet G., & Maeder A., 1992, A&AS, 96, 269

[1998] Schönberner D., Blöcker T., 1998, Introduction to Stellar Evolution. In: The Molecular Astrophysics of Stars and Galaxies, T.W. Hartquist und D.A. Williams (eds.), Clarendon Press, Oxford, p. 237

[1990] Sharp C.M., & Huebner W.F., 1990, ApJS, 72, 417

[1995] Sharp C.M., & Wasserburg G.J., 1995, Geochim. et Cosmochim. Acta, 59, 1633

[1991] Simpson J.P., 1991, ApJ, 368, 570

[1997] Smith V.V., 1997, Chpt. XI in: Wallerstein G., Rev. Mod. Phys 69, 1042

[1990] Smith V.V., & Lambert D.L., 1990, ApJS, 72, 387

[1996] Snow T.P., & Witt A.N., 1996, ApJ, 468, L65

[1987] Srečec, I., Ender A., Woerman E. et al., 1987, Phys. Chem. Minerals 14, 492

[1989] Stephens J.R., 1989, in Solid state astrophysics, eds. Busoletti E., & Strazulla G. North Holland Publ., Amsterdam, p. 391

[1971] Stull D. H., Prophet H., 1971, JANAF Thermochemical Tables (2nd. ed.). NSRDS-NBS, 37, Nat. Bur. Stand. (US)

[1993] Thielemann F.-K., Nomoto K., Hashimoto M., 1993, In: Prantzos N., Vangioni-Flam E., Cassé M. (eds.), 1993, Origin and Evolution of the Elements, Cambridge University Press, Cambridge, p. 297

[1997] Tomkin J., Edvardsson B., Lambert D.L., Gustafsson B., 1997, A&A, 327, 587

[1973] Tsuji T., 1973, Molecular Abundances in Stellar Atmospheres. II. A&A, 23, 411

[1997] van Belle G.T., Dyck H.M., Thompson R.R., Benson J.A., & Kannappan S.J., 1997, AJ, 114, 2150

[1998] Van Eck S., Jorissen A., Udry S., Mayor M., & Pernier B., 1998, A&A, 329, 971

[1969] vander Auwera-Mahieu A., Mc Intyre N.S., & Drowart J., 1969, Chem. Phys. Lett., 4, 198

[1993] Vassiliadis E., & Wood P. R., 1993, ApJ, 413, 641

[1998] Wallerstein G., & Knapp G.R., 1998, ARA&A, 36, 369

[1968] Warner B., 1968, in Origin and Distribution of the Elements, ed. Ahrens L.H., Pergamon Press, Oxford etc., p. 205

[1996] Waters L.B.F.M., Molster F. J., de Jong T. et al. 1996, A&A, 315, L361

[1999] Waters L.B.F.M., Molster F.J., 1999, In: Le Bertre T, Lèbre A., Waelkens C. (eds.) Asymptotic Giant Branch Stars, IAU Symp. 191. p. 209

[2000] Willson L.A., 2000, ARA&A, 38, 573

[1997] Winters J.M., Fleischer A.J., Le Bertre T., Sedlmayr E., 1997, A&A, 326, 305

[1990a] Wood P.R., 1990a, in From Miras to Planetary Nebulae, eds. Menessier M.O., Omont A. Gif sur Yvette: Editions Frontières. p. 67

[1990b] Wood P.R., 1990b, in Confrontation between stellar pulsation and evolution, eds Cacciari C., Clementini G. ASP Conf. Series 11. p. 355

[1998] Xiong D.R., Deng L., & Cheng Q.L., 1998, ApJ, 499, 355

[1999] Zinner E., & Amari S., 1999, in Waelkens Asymptotic Giant Branch Stars, eds. T. Le Bertre A., Lèbre C. IAU Symposium 191, p. 59

Danksagung

Diese Arbeit wurde finanziert mit Mitteln aus der Deutschen Forschungsgemeinschaft, DFG (SFB 439 Galaxien im Jungen Universum).

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. H.-P. Gail für die Bereitstellung des Themas und die engagierte Betreuung. Seine unermüdliche Unterstützung und Geduld sowie sein hilfreicher Rat haben maßgeblich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Danken möchte ich auch Herrn Prof. W. Krätschmer für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Michael Mayer und Tobias Illenseer danke ich für die Administration der Institusrechner.

Den Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Astrophysik, insbesondere Martina Buchhaupt, Gunter Kaliwoda, Christof Keller, Michael Wehrstedt und Christian Graf danke ich für die nette und freundliche Arbeitsatmosphäre.

Jürgen Tallasch danke ich für das Durchsicht des Manuskripts.

Mario Bitter, Irina Janicke, Ingrid Medelsky danke ich für ihre Freundschaft und Hilfestellung.

Besonderen Dank möchte ich auch Thilo für die Unterstützung und Geduld während meines gesamten Studiums aussprechen.

Meinen Eltern Pablo und Angelica Ferrarotti und meiner Schwester Paola ebenso herzlichen Dank. Sie haben mir die notwendige Unterstützung gegeben und waren immer für mich da.

Deseo expresar un agradecimiento especial a mis padres y a mi hermana por el amor y apoyo que me brindaron durante todos estos años.

También quiero agradecer a mis amigos, en especial a los que a la distancia siempre me acompañan.