Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

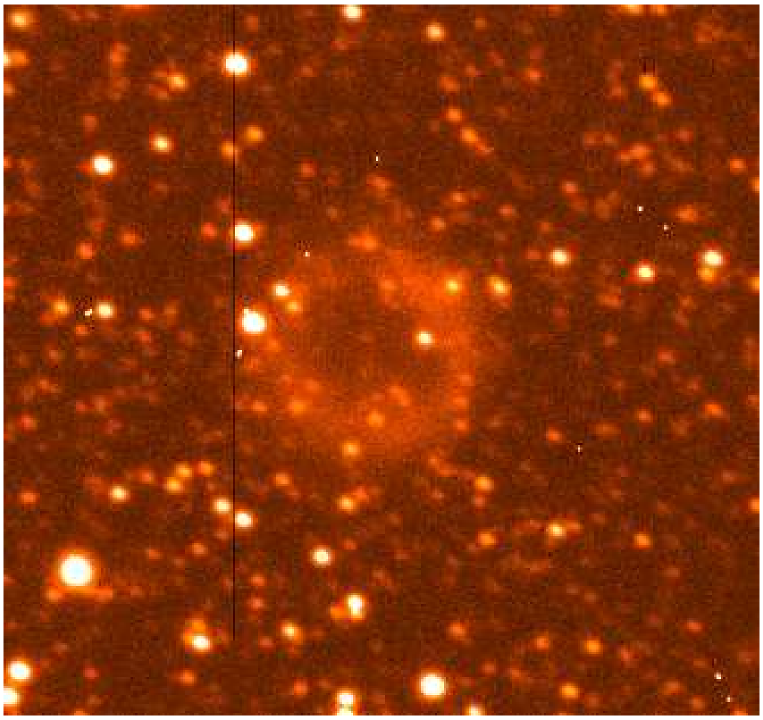
Diplomarbeit
im Studiengang Physik

vorgelegt von
Andrea S. Ferrarotti
aus Rosario/Argentinien

1999

Das Titelbild zeigt die Region um V4334 Sgr - auch Sakurai's Object genannt - in OIII (500.4 nm). Sakurai's Objekt ist ein S-Stern der zur Zeit den Helium Flash durchläuft. Der deutlich sichtbare Planetarische Nebel wurde durch den heißen Pre-Heliumflash Stern ionisiert. V4334 Sgr befindet sich in der Mitte des Rings und ist stark variabel, was unter anderem auch auf die Staubproduktion in der Sternhülle zurückzuführen ist. Aufgenommen am 7. August 1999 mit dem 3.6m + EFOSC2 auf La Silla (Beobachter: S. Els).

Staubbildung in den Hüllen um S-Sterne



Die Diplomarbeit wurde von Andrea S. Ferrarotti ausgeführt am
Institut für Theoretische Astrophysik
unter der Betreuung von
Herrn Prof. H.-P. Gail

Zusammenfassung
S-Sterne sind Übergangssterne am oberen Ende des AGB zwischen M- und C-Sternen. Der dritte „dredge-up“ in thermisch pulsenden AGB-Sternen treibt neu entstandenen Kohlenstoff aus der He-brennenden Schale in die Sternatmosphäre. Bei etwa gleicher Kohlenstoff- wie Sauerstoffhäufigkeit wird der Stern als zur Spektralklasse S gehörig eingestuft. Sterne am oberen Ende des AGB weisen durch massive Sternwinde verursachte hohe Massenverlustraten auf. In einer gewissen Entfernung vom Stern fällt die Temperatur des Gases unter die Kondensationstemperatur einiger mineralischer Verbindungen und von Ruß. Die Zusammensetzung des im ausströmenden Gas gebildeten Staubs hängt entscheidend von dem C/O-Verhältnis ab. In dieser Arbeit wurden die Kondensationsprozesse für die besondere Elementhäufigkeit beim M-S-C-Übergang auf dem AGB untersucht. Von thermodynamischen Gleichgewichtsrechnungen ausgehend konnte gezeigt werden, daß am wahrscheinlichsten FeSi, metallisches Eisen sowie geringe Mengen Forsterit und SiC auskondensieren. Die Staubbildung kann durch TiC, ZrC oder TiO_2 als Kondensationskeime ausgelöst werden. Für diese Stoffe wird die nicht im chemischen Gleichgewicht stattfindende Staubbildung im ausströmenden Gas mit einem einfachen Windmodell berechnet. Die Ergebnisse zeigen, daß in S-Sternen Staub gebildet wird.

Abstract
S-stars are transition objects at the top of the AGB between M- and C-stars. The third dredge-up in thermally pulsating AGB-stars transports newly synthesized carbon from the He burning zone into the stellar atmosphere. If the carbon and oxygen abundance are about equal the star is classified as being of spectral type S. Stars at the top of the AGB are subject to large mass-loss caused by a strong stellar wind. At some distance from the star the temperature of the gas drops below the condensation temperature of some mineral compounds and soot. This results in optically thick dust shells which are sources of an intense IR-radiation from warm dust. The composition of the dust formed in the stellar outflow critically depends on the C/O-ratio. In this work we have investigated the condensation processes for the peculiar element mixture of the M-S-C transition on the AGB. From thermodynamic equilibrium calculations we find that the most likely solids to be formed are solid FeSi, metallic iron and small quantities of forsterite and SiC. Nucleation of dust may be triggered by TiC, ZrC or TiO_2. For these substances, non-equlibrium dust condensation in the outflow is calculated for a simple wind model. The results of our calculation show that dust condensates in S-Stars.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung

Kühle Riesen und Überriesen stellen einen weit fortgeschrittenen Zustand der Sternentwicklung dar. In dieser Phase weisen die Sterne einen starken Massenverlust auf, pro Jahr geben sie bis zu 10^{-7} Sonnenmassen an das interstellare Medium ab. In der ausströmenden Materie kondensieren Staubpartikel aus der Gasphase aus und bilden überwiegend optisch dicke Staubhüllen.

Die zirkumstellaren Hüllen der leuchtkräftigen, kühlen Sterne des asymptotischen Riesenastes (*asymptotic giant branch* : *AGB*) liefern den größten Beitrag zur Anreicherung des Interstellaren Mediums mit schweren Elementen.

Die späten Riesen werden anhand der vorherrschenden Moleküllinien im optischen Spektrum der Sterne verschiedenen Spektralklassen zugeordnet. In den Atmosphären von M-Sternen ist TiO besonders häufig. S-Sterne charakterisieren sich durch starke ZrO-Banden. In den Spektren von C-Sternen sind die C_2-Linien besonders ausgeprägt.

Die theoretische Analyse durch Modelle für Sternatmosphären zeigt, daß die Unterschiede in den Spektren auf unterschiedlichen Häufigkeitsverhältnissen von Sauerstoff und Kohlenstoff beruhen. Sterne mit $C/O<1$ gehören zur Spektralklasse M, Sterne mit $C/O>1$ sind C-Sterne. Bei einem Verhältnis $C/O\approx1$ gehört ein Stern zur Spektralklasse S.

Ein großer Teil dieser Sterne zeigt im fernen Infrarotbereich auf dem Untergrund einer kontinuierlichen Emission auch breite Emissionsbanden, die bei den massiven Staubhüllen der Infrarotobjekte auch in Absorption beobachtet werden.

Bei M-Sternen treten zwei breite Emissions- bzw. Absorptionsbanden auf, die um 9.7μm und 18μm zentriert sind. Diese werden als Absorptionsbanden in Silikatmaterialen identifiziert. Die 9.7μm-Bande kann mit Dehnungsschwingungen der Si-O-Bindung erklärt werden und die 18μm-Bande mit Beugungsschwingungen des Valenzwinkels der O-Si-O-Gruppe im SiO_4-Tetraeder der Silikate (Treffers und Cohen [44]). In C-Sternen treten praktisch keine markanten Absorptionsbanden auf. Manche Kohlenstoffsterne zeigen jedoch eine breite Bande, die um 11.15μm zentriert ist. Diese wird als Absorptionsbande in Siliziumkarbid identifiziert (Treffers und Cohen [44]).

Es sind auch einige Fälle bekannt, in denen bei optisch sichtbaren C-Sternen das Vorkommen von Silikatbanden nachgewiesen wurde (Little Marenin [23], Willems und de Jong [47]. Dies gilt als Nachweis dafür, daß der Stern sich von einem M-Stern über einen S-Stern zu einem C-Stern entwickelt hat.

Für M- und C-Sterne wurde die Kondensation von Staub im Sternwind in einer Reihe von Arbeiten ausführlich untersucht (Wichtige Arbeiten sind: Grossman [16], Saxena & Eriksson [33], Sharp & Huebner [39]), Lattimer et al. [21] und Lodders & Fegley [24]). Mögliche Kondensate in S-Sternen waren bisher aber noch nicht Gegenstand von Untersuchungen. Es ist daher ein wichtiges Ziel dieser Arbeit festzustellen, aus welchen Bestandteilen sich der Staub bei S-Sternen zusammensetzt.

Die Arbeit gliedert sich in sieben Teile. In den ersten zwei Kapiteln werden zunächst die allgemeinen physikalischen Grundlagen entwickelt und dargestellt. Hierbei wird auf die Sternentwicklung und dabei insbesondere auf die Nachhauptreihenentwicklung von Sternen mittlerer Masse eingegangen. In Kapitel 3 wird die Entstehung von Sternwinden beschrieben.

In Kapitel 4 wird dann die Zusammensetzung der Gasphase im chemischen Gleichgewicht berechnet. Zunächst werden die Partialdrucke der Elemente berechnet und anhand dieser die Häufigkeiten der jeweiligen Moleküle bestimmt.

Die so gewonnenen Ergebnisse dienen in Kapitel 5 als Grundlage zur Berechnung der möglichen Kondensate in S-Sternen. Hierzu werden die Aktivitäten aller in Frage kommenden Stoffe berechnet. Schließlich wird auf die Stabilitätsgrenzen der wichtigsten Kondensate eingegangen.

In Kapitel 6 werden Wachstum und Kondensationsgrad der Staubteilchen in zirkumstellaren Hüllen berechnet. Dies geschieht in einem einfachen Windmodell unter Verwendung der möglichen Kondensate, welche in Kapitel 5 bestimmt wurden. Anders als in den Kapiteln 4 und 5 liegt hier jedoch kein chemisches Gleichgewicht zwischen Gas und Festkörper mehr vor, so daß die kinetischen Gleichungen für das Staubwachstum im ausströmenden Gas zu lösen sind. Abschließend beinhaltet Kapitel 7 eine Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse.

2. Sternentwicklung

Im Laufe ihres Lebens durchlaufen die Sterne eine Reihe von Entwicklungsstadien, die hauptsächlich von ihrer Anfangsmasse und in geringerem Maße von der chemischen Zusammensetzung ihrer Materie abhängig sind. 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, so daß die Energieproduktion durch den CNO-Zyklus dominiert wird. Aufgrund der hohen T-Empfindlichkeit 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, so daß 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 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. Die Bewegung im Hertzsprung-Russel-Diagramm (HRD) verläuft langsam zunächst etwas nach oben und dann nach rechts; der Stern wird heller und röter.

Die Nachhauptreihen-Entwicklung hängt stark von der Sternmasse ab (s. Abb. 2.1). Da sich diese Arbeit speziell mit S-Sternen auf dem AGB befaßt, soll nachfolgend die Nachhauptreihen-Entwicklung von Sternen mittlerer Masse dargestellt werden.

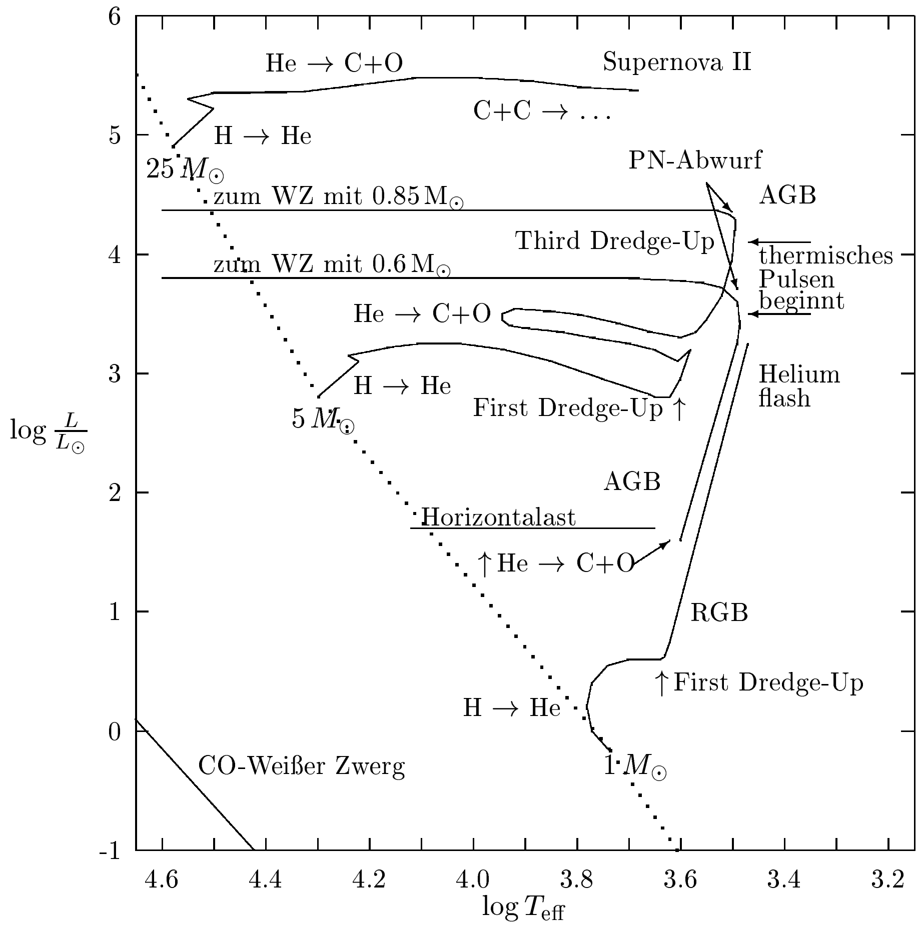


Abbildung 2.1 Nachhauptreihen-Entwicklung. Daten nach Iben Jr. [19]

2.1 Entwicklung von Sternen mittlerer Masse

Im Gegensatz zu den massenarmen Sternen haben diese Sterne genügend Masse, um das He-Brennen zu zünden.

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). Der Kern ist nicht mehr isotherm und die Temperatur fällt streng monoton nach außen ab. Das führt zur Veränderung seiner inneren Struktur. Bei der Hüllen-Expansion bewegt sich der Stern rasch horizontal nach rechts im HRD bis zur Hayashi-Grenze. Während des Heliumbrennens durchläuft er, wiederum in nuklearer Zeitskala, im HRD eine Schleife zunächst nach links und dann wieder, im Gebiet der Roten Riesen, nach rechts.

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

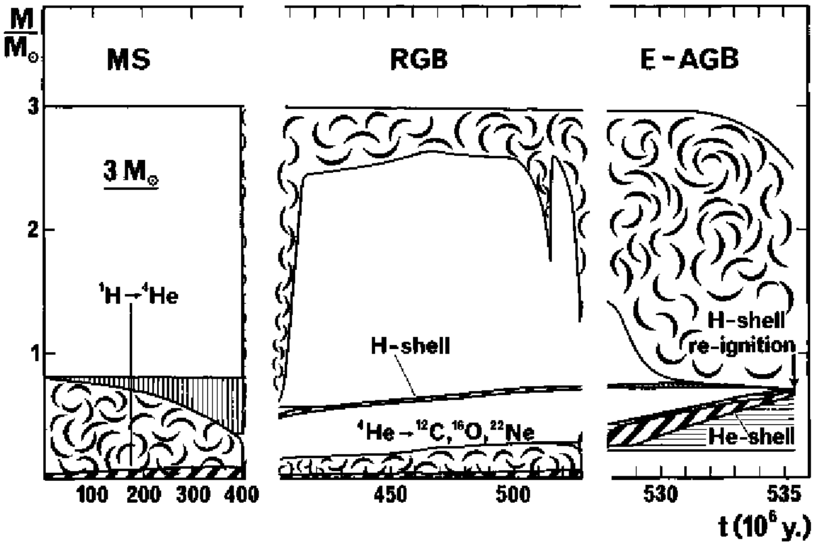


Abbildung 2.2 Modell des inneren Aufbaus eines 3 $M_\odot$ Sterns. Regionen mit Kernbrennen werden durch schräge Schraffur markiert. Die Zonen mit Wasserstoff und Helium sind vertikal schraffiert und die horizontal schaffierten Regionen zeigen ^{12}C, ^{16}O und ^{22}Ne. Die mit wirbelartigen Linien ausgefüllten Flächen kennzeichnen die konvektiven Bereiche. Abb. aus Maeder and Meynet [28].

darüber eine H-brennende Schale. Diese Sterne haben nicht genügend Masse, um die notwendige Temperatur zur Zündung des C-Brennens zu erreichen. Rote Riesensterne befinden sich auf dem AGB, wo ihre Leuchtkraft ständig zunimmt, während ihre effektive Temperatur geringfügig abnimmt.

Die AGB-Sterne werden in zwei Gruppen unterteilt, die frühen AGB (E-AGB)-Sterne, in denen noch keine thermischen Pulse stattgefunden haben und die TP-AGB-Sterne, die sich in der thermisch pulsenden Phase befinden. Während der E-AGB-Phase ist das H-Brennen ausgegangen und das Helium brennt in einer darunterliegenden Schale. Gegen Ende dieser Phase brennt der Wasserstoff wieder in einer dünnen Schale, und der Stern fängt an zu pulsen.

Die dominierende Energiequelle für einen thermischen Puls ist der 3α Prozeß. Da das Brennen in einer Region geschieht, in der die Elektronen nicht entartet sind, wird die freigesetzte Energie direkt dazu verwendet, um den lokalen Druck zu erhöhen und eine Expansion einzuleiten. Sobald die Expansion weit genug vorangekommen ist, setzt die Abkühlung ein, und das He-Brennen beginnt auszugehen.

Die Expansion, die durch das He-Brennen initiiert wird, treibt Materie bis an und über die Wasserstoff-Helium-Grenze hinaus, bis zu dermaßen niedrigen Temperaturen und Drucken, daß das H-Brennen erlischt. Wenn die Leuchtkraft der He-brennenden Schale L_{He} unter die Leuchtkraft der Oberfläche L fällt, sinkt Material zurück, und die Temperatur steigt, bis der Wasserstoff erneut anfängt zu brennen. Das He-Brennen nimmt langsam ab, wobei das H-Brennen immer stärker wird, bis die Leuchtkraft des Wasserstoffs L_{H} etwa gleich L und $L_{\mathrm{He}} << L$ ist. Es folgt danach eine lange Periode, in der die Wasserstoffschale wieder brennt. Nach Erreichen einer kritischen Masse ΔM_{H} wird ein weiterer thermischer Puls initiiert.

Während des He-Brennens wird Kohlenstoff erzeugt, der (in der nicht pulsierenden Phase) an die Oberfläche gelangt.

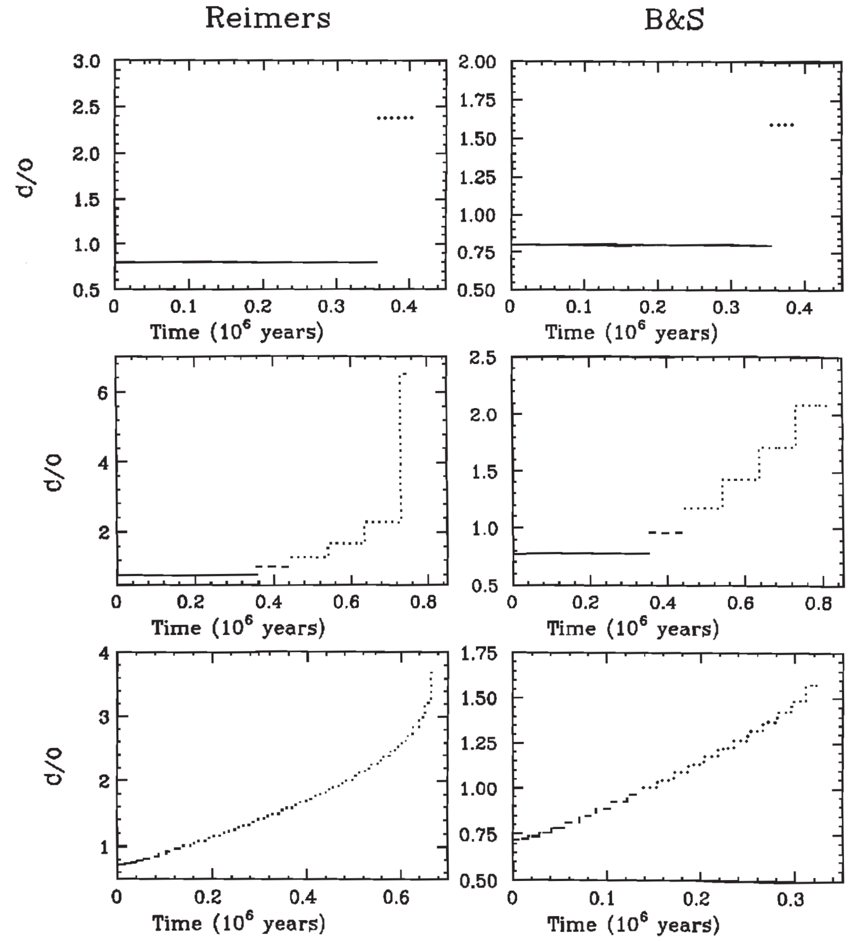


Abbildung 2.3 Entwicklung des C/O-Verhältnisses für $1.5M_\odot$ (oben), $2M_\odot$ (mitte) und $4M_\odot$ (unten). Die M-, S- und C-Phase der Sternentwicklung ist jeweils durchgezogen, gestrichelt und punktiert dargestellt. Abb. aus Groenewegen et al. [17].

Die Prozesse der brennenden Schalen und die Effizienz des dritten „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 zu einem C-Stern (ca. 10^4a). 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, erfolgt die zeitliche Veränderung des C/O- Verhältnisses in Stufen. Sterne mit 4 bis 5 $M_\odot$ haben eine kürzere Periode zwischen zwei Pulsen als solche mit geringerer Masse und durchlaufen damit eine größere Anzahl von Pulszyklen während ihrer AGB-Phase, so daß sie S-Sterne werden (s.Abb. 2.3).

In späten Entwicklungsphasen verlieren die Sterne genügend Masse durch Sternwinde, so daß die äußere wasserstoffreiche Hülle vollständig verlorengeht. Bleibt der

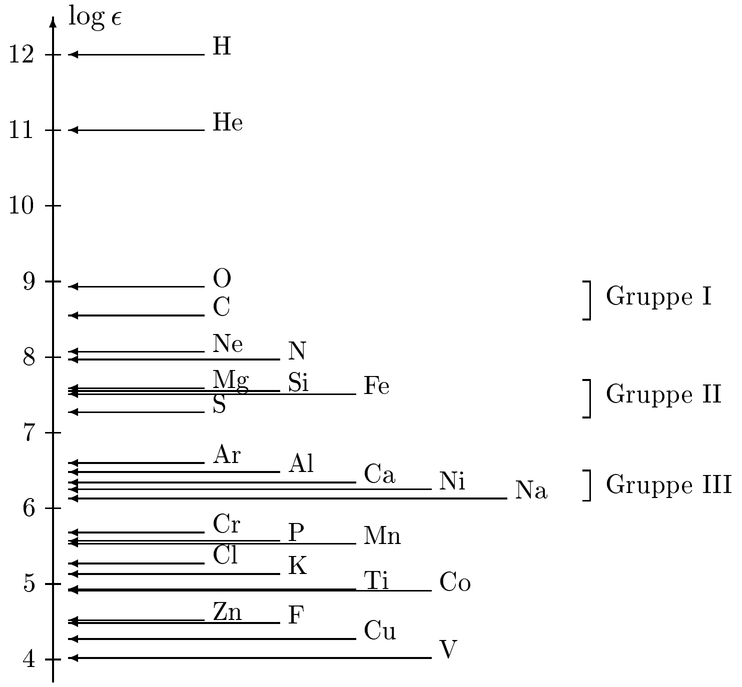


Abbildung 2.4 Kosmische Häufigkeit der 26 häufigsten Elemente. Daten nach Anders und Grevesse [1] und Grevesse und Noels [15].

elektronenentartete Kern unterhalb einer Grenzmasse ($M_{\mathrm{WZ}} \approx 1.2 - 1.4 M_\odot$), so endet der Stern seine Entwicklung als *Weißer Zwerg*.

2.2 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. 2.4) 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 unter diesen 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.

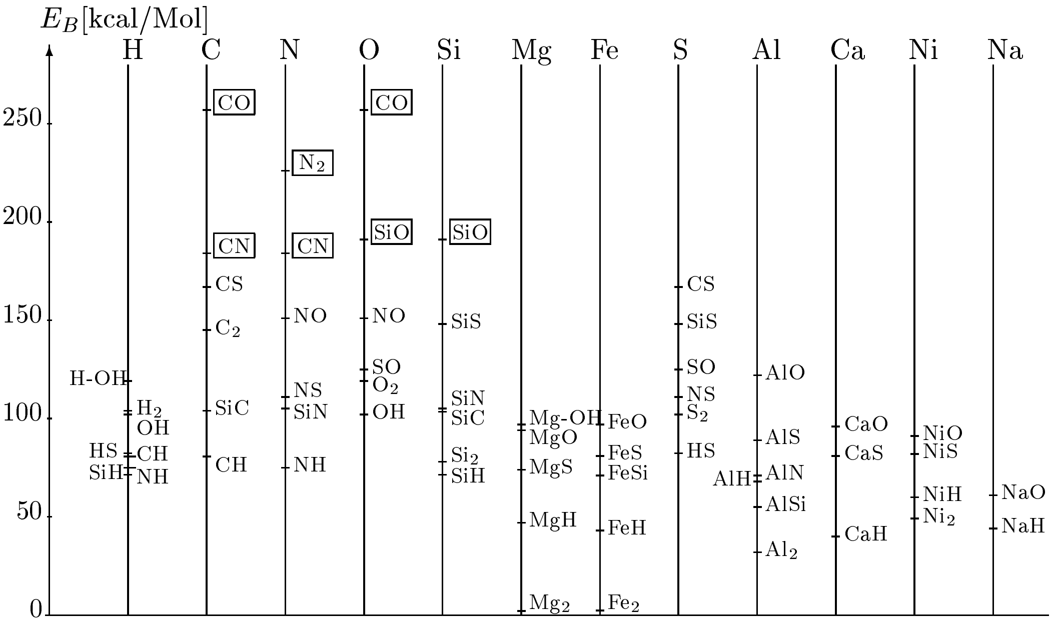


Abbildung 2.5 Bindungsenergien zweiatomiger Moleküle der häufigsten Elemente und einiger Radikal-Bindungsenergien. Besonders zu beachten sind die außergewöhnlich hohen Bindungsenergien von CO, N_2, SiO und CN. (Daten aus CRC-Handbuch, Lide [22])

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 größer als die von Kohlenstoff ist ($\varepsilon_{\mathrm{O}} > \varepsilon_{\mathrm{C}}$). Diese Elementmischung wird bei allen Hauptreihensternen und einem größeren Teil aller weit entwickelten Riesensterne auf dem AGB angetroffen. Diese Sterne sind vom Spektraltyp M.

Es gibt auch einige Sterntypen, die eine *anomal* zusammengesetzte Atmosphäre zeigen. Ein Beispiel sind die weit entwickelten Sterne, die kurz vor dem Ende ihrer Lebensdauer ein Häufigkeitsverhältnis von $[\mathrm{C}]/[\mathrm{O}] > 1$ zeigen, in der Regel durch Hochmischung (Turbulenz) oder Freilegen (Sternwind) von in den Sternen schon nuklear prozessiertem Material.

2.3 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. 2.5 und 2.6 sind die Bindungsenergien der wichtigsten Moleküle der Elemente dargestellt. Nur Moleküle mit der höchsten Bindungsenergie können in den kühlen Sternatmosphären existieren. Daher kommen nur wenige und einfach gebaute Moleküle in Sternatmosphären vor.

In der Standardmischung ($\varepsilon_{\mathrm{O}} > \varepsilon_{\mathrm{C}}$) ist das häufigste Molekül H_2, sofern die Temperatur niedrig genug für dessen Bildung ist. Von den Elementen O, C und N sind Ver-

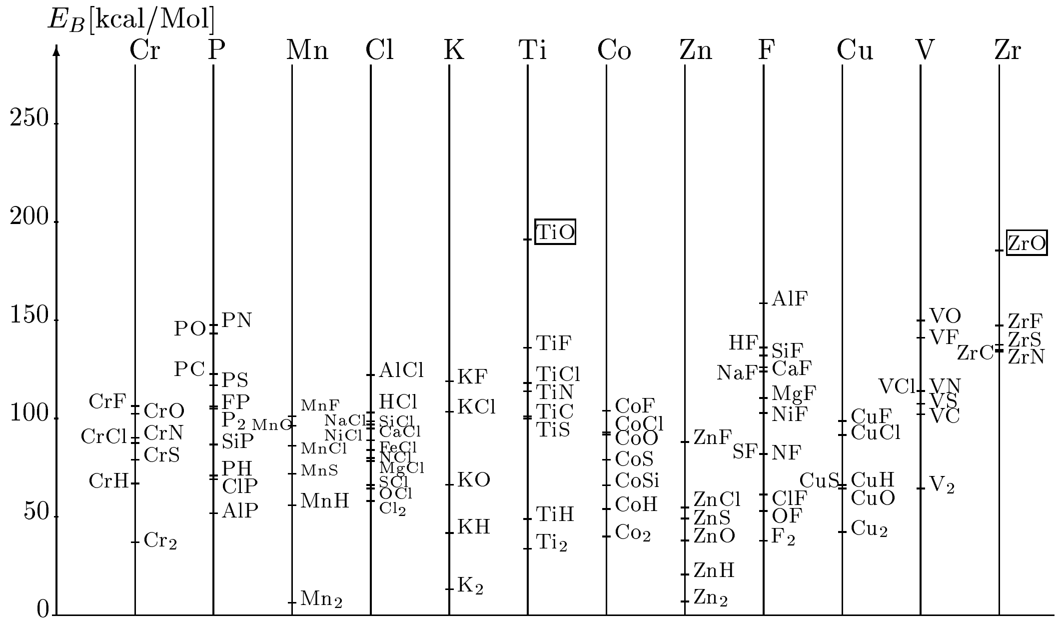


Abbildung 2.6 Bindungsenergien zweiatomiger Moleküle der etwas weniger häufigen Elemente. (Daten aus CRC-Handbuch, Lide [22])

bindungen 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 Silikatmineralien 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.

Aluminium hat 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 ($\varepsilon_{\rm O} < \varepsilon_{\rm C}$) 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. Staubhüllen und zirkumstellarer Staub

Alle späten Riesen und Überriesen der Spektralklassen M, S, und C mit zirkumstellaren Hüllen haben einen Sternwind mit erheblichen Massenverlustraten. Diese Sterne sind die Hauptquellen für den interstellaren Staub oder für Kondensationskeime für solchen Staub.

Die beobachteten Massenverlustraten liegen bei $\approx 10^{-7}\mathrm{M}_{\odot}a^{-1}$ am unteren Ende des AGB und mehr als $\approx 10^{-4}\mathrm{M}_{\odot}a^{-1}$ am oberen Ende des AGB. Die Ausströmgeschwindigkeit liegt typischerweise im Bereich von 10 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ bis 20 $\mathrm{km\,s^{-1}}$ (Schönberner & Blöcker [38]). Die Staubpartikel kondensieren direkt im ausströmenden und sich dabei abkühlenden Gas aus und bilden überwiegend optisch dicke Staubhüllen (am oberen Ende des AGB).

Der Wind kühler Sterne ist neutral und besteht hauptsächlich aus molekularem Gas. Die Temperatur fällt mit zunehmendem Abstand vom Stern ab, so daß unterhalb von $\mathrm{T_c} = 1000$ K Staubpartikel auskondensieren. Für den radialen Temperaturverlauf gilt im optisch dünnen Fall in grauer Näherung (s. Gail & Sedlmayr [13])

$$T(r) = \frac{T_*}{\sqrt[4]{2}} \left(\frac{R_*}{r} \right)^{\frac{1}{2}} \quad . \tag{3.1}$$

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 äußere 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 auf die Staubteilchen durch Reibungskopplung auf das Gas übertragen. Bei leuchtkräftigen Sternen ist der Strahlungsdruck größer als die Schwereanziehung, so daß die Staubteilchen vom Stern wegbeschleunigt werden.

3.1 Strahlungsdruck

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

$$\mathbf{F}_{ph} = \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{abs}\, \mathbf{H}_\nu\ , \tag{3.2}$$

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 Photons berücksichtigt werden. Das führt zu einem zusätzlichen Term

$$\mathbf{F}_{ph} = \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{str}\, \mathbf{H}_\nu - \frac{4\pi}{c}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu^{str}\, \frac{1}{4\pi}\oint d\Omega_{\hat{\mathrm{l}}} I_\nu(\hat{\mathbf{l}}) \oint d\Omega_{\hat{\mathrm{k}}}\hat{\mathbf{k}}\omega(\hat{\mathbf{l}}\rightarrow\hat{\mathbf{k}})\ , \tag{3.3}$$

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 (3.3).

Man definiert einen flußgemittelten Absorptionskoeffizienten durch

$$\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}} = \frac{1}{H}\int_0^\infty d\nu\, \kappa_\nu\, H_\nu \tag{3.4}$$

mit

$$H = \int_0^\infty d\nu\, H_\nu\ . \tag{3.5}$$

Dann gilt für die radiale Kraftkomponente

$$\boxed{F_{ph} = \frac{4\pi}{c}\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}}\, H\ .} \tag{3.6}$$

3.2 Stationäre Sternwinde

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

$$L_* = 4\pi R_*^2\, \sigma\, T_{\mathrm{eff}}^4\ . \tag{3.7}$$

T_{eff} ist etwa gleich der Oberflächentemperatur.

Die Dynamik der Strömung wird bestimmt durch die Erhaltungsgleichung der Masse

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho\, v\ , \tag{3.8}$$

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

$$\rho\, v\, \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{GM_r}{r^2} + \frac{L_*}{4\pi c r^2} \langle \kappa \rangle_{\mathrm{H}} \,. \tag{3.9}$$

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

$$L_* = 4\pi R_*^2\, 4\pi H. \tag{3.10}$$

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

$$L_{\mathrm{Edd}} = \frac{4\pi\, c\, GM_*}{\langle \kappa' \rangle_{\mathrm{H}}} \,. \tag{3.11}$$

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

Die Impulsgleichung läßt sich wie folgt umformen:

$$v\, \frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1 - \Gamma) \tag{3.12}$$

mit

$$\Gamma = \frac{L_*}{L_{\mathrm{Edd}}} \,. \tag{3.13}$$

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

Der zweite Term auf der rechten Seite von (3.12) stellt die *effektive Schwerebeschleunigung* dar, die auf die Materie wirkt. Bei der Auflistung:

- $\Gamma < 1$. Für die Leuchtkraft

  $$L_* < L_{\mathrm{Edd}} \,. \tag{3.14}$$

  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 $L_* > L_{\mathrm{Edd}}$. Hier ist die effektive Schwerebeschleunigung positiv, also auswärts gerichtet. Die Schwerebeschleunigung kann in diesem Fall nicht kompensiert werden. Unter diesen Umständen wird die Materie nach außen strömen. Also:

$$\boxed{L_* > L_{\mathrm{Edd}} \Longrightarrow \textit{Sternwind}\ .} \tag{3.15}$$

Die Eddingtonsche Grenzleuchtkraft hängt von der Größe des flußgemittelten Absorptionskoeffizienten $\langle\kappa\rangle_{\mathrm{H}}$ 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 $L_* \geq 10^4 L_\odot$ (Dominik et al. [8]). 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 (3.12) wie folgt umformen:

- Zunächst wird der Druck eliminiert mit Hilfe der Zustandsgleichung für ideale Gase

$$p = \rho c_T^2\ . \tag{3.16}$$

Hier ist

$$c_T = \sqrt{\frac{kT}{\mu m_{\mathrm{H}}}} \tag{3.17}$$

die *isotherme Schallgeschwindigkeit* und μ das mittlere Molekulargewicht. Es gilt somit

$$v\,\frac{\partial v}{\partial r} = \underbrace{-\frac{c_T^2}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r}}_{-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r}} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ . \tag{3.18}$$

- Dann wird, mit Hilfe der Gleichung (3.8) der Massenerhaltung, die Dichte ρ eliminiert

$$v\,\frac{\partial v}{\partial r} = -c_T^2\underbrace{\left(-\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{r}\right)}_{\frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial r}} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ . \tag{3.19}$$

Schließlich ergibt sich ein Ausdruck für die Geschwindigkeit

$$\boxed{(v^2 - c_T^2)\frac{1}{v}\frac{\partial v}{\partial r} = 2\frac{c_T^2}{r} - \frac{\partial c_T^2}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma)\ .} \tag{3.20}$$

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 ist.

Die Differentialgleichung (3.20) hat bei $r = r_c$ einen singulären Punkt, für den

$$v(r_c) = c_T(r_c) \tag{3.21}$$

gilt.

Falls $v(r_c)$ stetig sein soll, muß die rechte Seite von Gleichung (3.20) an dieser Stelle ebenfalls verschwinden

$$2 - \frac{\partial \ln c_T^2}{\partial \ln x} - \frac{GM_*}{R_* c_T^2(x)} \frac{1 - \Gamma(x)}{x} = 0 \,, \tag{3.22}$$

wobei

$$x = \frac{r}{R_*} \tag{3.23}$$

eine dimensionslose Variable ist. R_* ist der Sternradius.

Mit der Bedingung (3.21) 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 (3.20) integriert, wobei der Druckgradient vernachlässigt wird, da die Strömung bei diesen Radien eine hohe Machzahl erreicht.

3.3 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.

3.3.1 Abschlußbedingung von Lucy

Aus den Momentengleichungen für die Strahlungsintensität kann man zu einer Näherung für den Temperaturverlauf gelangen (Lucy [26], [27]).

Das Momentengleichungssystem ist

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 H_\nu = -\kappa_\nu^{abs} J_\nu - \sum_i \kappa_{i\nu}^{abs} B_\nu(T_i) \,. \tag{3.24}$$

und

$$\frac{\partial K_\nu}{\partial r} + \frac{3K_\nu - J_\nu}{r} = -\kappa_\nu^{ext} H_\nu \; . \tag{3.25}$$

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

Mit dem folgenden Ansatz für die Winkelverteilung

$$I_\nu(r,\mu) = \begin{cases} I_\nu^+(r) & \text{für } \mu \geq \mu_* \\ I_\nu^-(r) & \text{für } \mu < \mu_* \end{cases} \quad , \tag{3.26}$$

wobei

$$\mu_* = \cos\Theta_* = \sqrt{1 - \left(\frac{R_*}{r}\right)^2} \tag{3.27}$$

ist, lassen sich die Momente berechnen. Es gilt

$$J_\nu = \frac{1}{2}[I_\nu^+ + I_\nu^-] - \frac{\mu_*}{2}[I_\nu^+ + I_\nu^-] \tag{3.28}$$

und

$$H_\nu = \frac{1}{4}[I_\nu^+ - I_\nu^-](1 - \mu_*^2) \; . \tag{3.29}$$

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

Für K_ν gilt

$$K_\nu = \frac{\mu_*^3 + 1}{6} I_\nu^- + \frac{1 - \mu_*^3}{6} I_\nu^+ \; . \tag{3.30}$$

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

$$\boxed{K_\nu = \frac{1}{3} J_\nu + \frac{2}{3}\mu_* H_\nu \; .} \tag{3.31}$$

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

Mit (3.31) lassen sich die Momentengleichungen wie folgt umformen

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 H_\nu = -\kappa_\nu^{abs} J_\nu - \sum_i \kappa_{i\nu}^{abs} B_\nu(T_i) \tag{3.32}$$

und

$$\frac{1}{3}\frac{\partial}{\partial r} J_\nu + \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\mu_* H_\nu + \frac{2}{r}\mu_* H_\nu = -\kappa_\nu^{ext} H_\nu \; . \tag{3.33}$$

Man definiert eine neue Tiefenvariable τ_L

$$\frac{\mathrm{d}\tau_L}{\mathrm{d}x} = -\frac{R_* \langle\kappa\rangle_H}{x^2} \tag{3.34}$$

mit folgender Randbedingung

$$\lim_{r\to\infty} \tau_L(r) = 0 \; . \tag{3.35}$$

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

Die frequenzintegrierten Gleichungen (3.32) und (3.33) können unter der Annahme von Strahlungsgleichgewicht und Verwendung der τ_L integriert werden. Für die mittlere Strahlungsintensität ergibt sich schließlich

$$J(r) = 2H_0 \left[1 - \mu_* + \frac{3}{2}\tau_L(r)\right] \tag{3.36}$$

wobei

$$H_0 = \frac{\sigma T_*^4}{4\pi} \tag{3.37}$$

ist, unter Berücksichtigung der Randbedingung

$$\lim_{r\to\infty} J(r) = 0 \; . \tag{3.38}$$

3.3.2 Temperaturschichtung

Nach Definition gilt im Strahlungsgleichgewicht

$$\kappa_B^{abs} \frac{\sigma T^4}{\pi} = \kappa_J^{abs} J \; . \tag{3.39}$$

Aus (3.36) kann man jetzt die Temperaturverteilung im Strahlungsgleichgewicht bestimmen

$$\boxed{T^4(r) = \frac{1}{2} T_*^4 \left[1 - \mu_*(r) + \frac{3}{2}\tau_L(r)\right] \frac{\kappa_J^{abs}}{\kappa_B^{abs}} \; .} \tag{3.40}$$

Diese Gleichung legt die Temperaturschichtung fest.

3.4 Staubopazität

Der Massenextinktionskoeffizient κ spielt bei der Modellierung eine wichtige Rolle.

Bei Temperaturen unterhalb von 1000 K kondensieren die Staubteilchen. Der Beitrag der Staubteilchen zum Massenabsorptionskoeffizienten übersteigt den Beitrag der Atome und Moleküle aus der Gasphase ganz erheblich. Existiert also Staub, so dominiert dieser die Opazität.

Zur Berechnung der Staubopazität wird angenommen, daß die Staubteilchen kleine Sphären 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. [29], das zur Berechnung der Extinktion durch interstellare Staubteilchen entwickelt wurde. Auf diese Weise erhält man den 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:

$$\kappa = \kappa_{\mathrm{ol}} f_{\mathrm{ol}} + \kappa_{\mathrm{Fe}} f_{\mathrm{Fe}} + \kappa_{\mathrm{Fesi}} f_{\mathrm{FeSi}} + \kappa_{\mathrm{SiC}} f_{\mathrm{SiC}} + \kappa_{\mathrm{C}} f_{\mathrm{C}} + \kappa_{\mathrm{Gas}} \, . \tag{3.41}$$

Dies würde exakt bei grauer Absorption gelten. Da die Extinktionskoeffizienten für Staub nur langsam mit λ variieren, gilt (3.41) 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 [13])

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{ol}}(T) \quad = \quad & \Big[(6.147 \cdot 10^{-7} T^{2.444})^{-2} + \big((6.957 \cdot 10^{4} T^{-2.329})^{2} + \\ & \sqrt{(3.505 \cdot 10^{-4} T^{0.755})^{4} + (1.043 \cdot 10^{-9} T^{2.523})^{4}}^{\,-1}\Big]^{-1/2} \, .\end{aligned} \tag{3.42}$$

Eisen (Fe): [1] (Gail & Sedlmayr [13])

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{Fe}}(T) \quad = \quad & \Big[\frac{1}{(3.341 \cdot 10^{-5} T^{1.632})^{4}} + \\ & \frac{1}{(6.405 \cdot 10^{-4} T^{.777})^{4} + (4.385^{-7} T^{1.981})^{4}}\Big]^{-1/4} \, .\end{aligned} \tag{3.43}$$

[1]Der Massenextinktionskoeffizient von FeSi wurde gleich dem von Fe gesetzt.

Siliziumkarbid (SiC): (Optische Konstanten aus Pegourie [32])

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{SiC}}(T) &= \Big[\frac{1}{(9.560\cdot 10^{-6}T^{1.710})^4} + \\ &\quad \frac{1}{(7.791\cdot 10^{-4}T^{.8808})^4 + (1.171\cdot 10^{-6}T^{1.879})^4}\Big]^{-1/4} .\end{aligned} \tag{3.44}$$

Ruß (C): (Optische Konstanten aus Draine [10])

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{C}}(T) &= \Big[\frac{1}{(1.692\cdot 10^{-4}T^{1.813})^4} + \\ &\quad \frac{1}{(3.167\cdot 10^{-2}T^{.612})^4 + (2.938\cdot 10^{-5}T^{1.750})^4}\Big]^{-1/4} .\end{aligned} \tag{3.45}$$

Gas: (Bell & Lin [3])

$$\kappa_{\mathrm{Gas}} = 1\cdot 10^{-8}\cdot \rho^{2/3}\cdot T^3 . \tag{3.46}$$

4. Chemie der Gasphase

4.1 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

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

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

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.

4.2 Massenwirkungsgesetz

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. Das Vorzeichen von $dk = \pm 1, \pm 2, ...$ hängt von der Richtung der Reaktion ab.

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

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

Da man es in der Astrophysik fast immer mit stark verdünnten Gasen zu tun hat, kann man annehmen, daß für jede einzelne Gaskomponente des Gasgemisches die ideale Gasgleichung gilt.

Zunächst wird das chemische Potential für ein ideales Gas berechnet. Man verwendet dazu:

- die ideale Gasgleichung

$$pV = N k_{\mathrm{B}} T \; , \tag{4.9}$$

- die Volumenabhängigkeit der Energie

$$U(T, N) = N e(T) \; , \tag{4.10}$$

- und

$$S(T,V,N) = N\left(\int_{T_0}^{T} dT' \frac{c_V(T')}{T'} + k_\mathrm{B} \ln \frac{V}{N} + const.\right) \tag{4.11}$$

für die Entropie eines idealen Gases.

Aus $G(T,p,N) = U - TS + pV = N\,\mu(T,p)$ folgt

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{U}{N} - \frac{TS}{N} + \frac{pV}{N} \\ &= e(T) - T\left(\int_{T_0}^{T} dT' \frac{c_V(T')}{T'} + k_\mathrm{B} \ln \frac{V}{N} + const.\right) + k_\mathrm{B}T \ . \end{aligned} \tag{4.12}$$

Die auftretenden Temperaturabhängigkeiten werden zu einer nicht weiter spezifizierten Funktion $f(T)$ zusammengefaßt:

$$\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T} = -f(T) - \ln \frac{V}{N} + const. = -f(T) - \ln \frac{p}{k_\mathrm{B}T} + const. \tag{4.13}$$

Für $\mu(T,V/N_i)$ unter Berücksichtigung von $N_i/V = p_i/kT$ gilt

$$\frac{\mu_i}{k_\mathrm{B}T} = -f_i(T) - \ln \frac{p_i}{k_\mathrm{B}T} + const. \tag{4.14}$$

p_i ist der Partialdruck der i-ten Komponente im Gemisch. Man multipliziert beide Seiten mit ν_i und summiert über i. Im Gleichgewicht verschwindet wegen (4.8) die linke Seite. Dann folgt

$$\begin{aligned} 0 &= -\sum_i \nu_i f_i(T) + \sum_i \nu_i \ln p_i - \sum_i \nu_i \ln(k_\mathrm{B}T) \\ &= \ln \prod_i p_i^{\nu_i} - \ln K(T) \ . \end{aligned} \tag{4.15}$$

Die Auflösung nach dem Produkt der Partialdrucke ergibt

$$\boxed{\prod_i p_i^{\nu_i} = K_p(T) \quad \text{Massenwirkungsgesetz (MWG)} \ .} \tag{4.16}$$

$K_p(T)$ hängt nur von der Temperatur ab. Diese Größe heißt *Massenwirkungskonstante*. Das MWG stellt einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Partialdrucken der Moleküle im chemischen Gleichgewicht her. Für die Massenwirkungskonstante gilt

$$K_p(T) = e^{-\sum_i \nu_i \mu_i/(k_\mathrm{B}T)} \ . \tag{4.17}$$

Man kann das MWG in der Form

$$\prod_i \left(\frac{p_i}{p_0}\right)^{\nu_i} = e^{-\sum_i \nu_i \mu_i^0/(k_\mathrm{B}T)} = K_p(T) \tag{4.18}$$

schreiben. p_i ist der Partialdruck der i-ten Spezies in dem Gemisch und p_0 ist ein Referenzdruck, für den die freie Enthalpie berechnet wird. In der Thermodynamik wird p_0 üblicherweise gleich dem Druck unter Normalbedingungen, also $p_0 = 1$ atm[1], gesetzt.

Man erweitert diese Gleichung mit der Avogadrozahl N_0 und erhält dann

$$\prod_i \left(\frac{p_i}{p_0}\right)^{\nu_i} = e^{-\sum_i \nu_i N_o \mu_i^0/(RT)} \tag{4.19}$$

mit der Gaskonstanten $R = kN_0$.

Schließlich ergibt sich für das MWG

$$\prod_i \left(\frac{p_i}{p_0}\right)^{\nu_i} = e^{-\sum_i \nu_i G_i/RT} \; . \tag{4.20}$$

$G_i = N_0 \mu_i^0$ ist die freie Enthalpie eines Mols der Teilchensorte i, bezogen auf den Standarddruck p_0.

In der Gleichung (4.20) schreibt man oft

$$\sum_i \nu_i G_i = \Delta G \; . \tag{4.21}$$

ΔG ist die Änderung der freien Enthalpie bei der Reaktion.

Wenn eine chemische Reaktion die Form

$$i \cdot A + j \cdot B + ... \longrightarrow n \cdot C + k \cdot D + ... \tag{4.22}$$

hat, dann kann man das MWG für diese Reaktion in der Form

$$\frac{p_C^n \cdot p_D^k \cdot ...}{p_A^i \cdot p_B^j \cdot ...} = e^{-\sum_i \Delta G_i/RT} = K_p(T) \tag{4.23}$$

schreiben. Für die Änderung der Enthalpie bei der Reaktion gilt

$$\Delta G = n \cdot G_C + k \cdot G_D + ... - i \cdot G_A - j \cdot G_B - ... \tag{4.24}$$

Im chemischen Gleichgewicht muß (4.23) für jede mögliche Reaktion der verschiedenen Spezies im Gemisch gelten.

Zur Berechnung der chemischen Zusammensetzung in einem Gemisch bei einer bestimmten Temperatur benötigt man immer nur die Gleichungen für die Bildung der Moleküle aus den freien Atomen und die zugehörige Änderung der freien Enthalpie.

[1] Neuerdings meistens $p_0 = 1$ bar. In der Astrophysik wird der Standarddruck in der Einheit dyn cm^{-2} verwendet ($p_0 = 1.0132510^6$ dyn cm^{-2})

4.3 Berechnung der Massenwirkungskonstante

Die Änderung der freien Enthalpie kann mit den Methoden der statistischen Mechanik aus den Bindungsenergien und Energiezuständen der Teilchen berechnet werden. Dies ist für eine große Zahl von Molekülen durchgeführt worden, und die Ergebnisse stehen in Form von Tabellen oder Polynomfits für ΔG zur Verfügung. Die Massenwirkungskonstanten

$$K_{p_i} = e^{-\Delta G_i/RT} \tag{4.25}$$

berechnet man bei einer numerischen Rechnung am besten aus Polynomapproximationen der Form

$$\Delta G(T) = aT^{-1} + b + cT + dT^2 + eT^3 + fT^4 \; . \tag{4.26}$$

In dieser Arbeit werden die Polynomapproximationen von Sharp und Hübner [39] verwendet. Diese wurden für eine Anzahl zusätzlicher Moleküle durch die Polynomapproximationen aus Tsuji [45] ergänzt. Der Wert von ΔG_{FeH} wurde aus Schiavon et al. [37] entnommen.

4.4 Berechnung der chemischen Zusammensetzung der Gasphase

Die chemische Zusammensetzung der Gasphase muß bei gegebenem Druck und gegebener Temperatur für eine bestimmte Elementmischung berechnet werden.

4.4.1 Das Gleichungssystem

Der gesamte Druck ist im idealen Gas die Summe der Partialdrucke p_i der einzelnen Komponenten i in dem Gemisch

$$p = \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Moleküle } i}} p_i \; . \tag{4.27}$$

Man definiert einen fiktiven Druck P_{H} durch

$$P_{\mathrm{H}} = \sum_{\substack{\text{alle Moleküle } i \\ \text{die H enthalten}}} j_i p_i \; . \tag{4.28}$$

j_i ist die Anzahl der H-Atome, die im Molekül i enthalten sind. Weiterhin definiert man den fiktiven Partialdruck des Elements k durch

$$P_k = \sum_{\substack{\text{alle Moleküle } i \\ \text{die das Element } k \text{ enthalten}}} j_{k,i} p_i \; . \tag{4.29}$$

Tabelle 4.1 Elementhäufigkeiten der wichtigsten Elemente eines Sterns auf der Hauptreihe und auf dem asymptotischen Riesenast.

Element	$\epsilon/\epsilon_{H\,\text{(auf der HR)}}$	$\epsilon/\epsilon_{H\,\text{(auf dem AGB)}}$		
	M	M	S	C
He	$9.75 \cdot 10^{-2}$	$1.04 \cdot 10^{-1}$	$1.04 \cdot 10^{-1}$	$1.04 \cdot 10^{-1}$
C	$3.55 \cdot 10^{-4}$	$2.33 \cdot 10^{-4}$	$6.87 \cdot 10^{-4}$	$8.24 \cdot 10^{-4}$
O	$7.41 \cdot 10^{-4}$	$6.87 \cdot 10^{-4}$	$6.87 \cdot 10^{-4}$	$6.87 \cdot 10^{-4}$
N	$9.33 \cdot 10^{-5}$	$2.52 \cdot 10^{-4}$	$2.52 \cdot 10^{-4}$	$2.52 \cdot 10^{-4}$
Zr	$4.09 \cdot 10^{-10}$	$4.09 \cdot 10^{-10}$	$4.09 \cdot 10^{-9}$	$4.09 \cdot 10^{-9}$

Hier ist $j_{k,i}$ die Anzahl der Atome des Elements k im Molekül i. Sei ϵ_k die Häufigkeit eines Elements k relativ zum Wasserstoff, dann gilt

$$P_k = \epsilon_k \; P_{\mathrm{H}} \; . \tag{4.30}$$

Da die Elementhäufigkeiten ϵ_k vorgegeben werden, sind die P_k eindeutig durch P_{H} bestimmt.

Für jedes einzelne Molekül gilt ein Massenwirkungsgesetz

$$p_i = \prod_k \tilde{p}_k^{\,j_{k,i}} \; K_{p,i} \; , \tag{4.31}$$

wobei $\tilde{p}_k$ die Partialdrucke der freien Atome des Elements k in der Gasphase sind. Wenn man die Beziehung (4.31) für jedes Molekül für den Partialdruck des Moleküls in den Gleichungen (4.27), (4.28) und (4.29) einsetzt, dann ergeben sich bei K verschiedenen Elementen insgesamt $K + 1$ Gleichungen für die Partialdrucke $\tilde{p}_i$ und die Hilfsgröße P_{H}. Dieses Gleichungssystem ist stark nichtlinear und muß durch ein Iterationsverfahren gelöst werden.

Die Partialdrucke der einzelnen Moleküle ergeben sich aus den Massenwirkungsgesetzen (4.31).

4.4.2 Elementhäufigkeiten

Die Tabelle 4.1 zeigt die im Modell verwendeten Elementhäufigkeiten. Ausgehend von der normalen Häufigkeit auf der Hauptreihe (Anders & Grevesse [1], Grevesse & Noels [15]) sind die Häufigkeiten der Elemente He, C, O und N nach den Verhältnissen, die sich für die Änderungen der Häufigkeit in der Atmosphäre des Sterns bei der Entwicklung von der Hauptreihe bis zum frühen AGB ergeben, skaliert. Die Änderungen der Elementhäufigkeiten in Tabelle 4.2 sind Modellrechnungen von Schaller et al. [35] für die Entwicklung von Sternen kleiner und mittlerer Masse entnommen. Diese Verhältnisse hängen geringfügig von der Anfangsmasse auf der Hauptreihe ab. Die Unterschiede sind nicht sehr stark, und in dieser Arbeit werden die Werte für einen Stern mit $\mathrm{M} = 5\mathrm{M}_{\odot}$ verwendet, die als repräsentativ gelten können. Die dritte Spalte in Tabelle 4.1 zeigt die Häufigkeiten der Elemente He, C, O und N für M-Sterne auf dem AGB, die hier verwendet werden. S-Sterne haben meistens gleiche

Tabelle 4.2 Verhältnisse der Elementhäufigkeiten der wichtigsten Elemente, nachdem ein Stern den unteren Teil des AGB erreicht hat, zu den ursprünglichen Häufigkeiten auf der Hauptreihe (nach Schaller et al. [35]).

Element	$\epsilon_{(AGB)}$ / $\epsilon_{(HR)}$
He	1.07
C	0.655
O	0.926
N	2.7

Häufigkeiten von C und O. Im „3rd dredge-up“ wird im wesentlichen Kohlenstoff aus dem Inneren der Sternatmosphäre hochgemischt. Die O- und N-Häufigkeiten werden dabei nicht verändert. Die Zr-Häufigkeit ist um einen Faktor 10 erhöht (Smith & Lambert [40]). Die Ursache dafür sind die ^{13}C(α,n)-Prozesse. Die vierte Spalte in Tabelle 4.1 zeigt die Häufigkeiten der Elemente He, C, O und N für S-Sterne auf dem AGB, die hier verwendet werden.

Die C-Häufigkeit der Kohlenstoffsterne auf dem AGB ist um bis zu 20% größer als die Häufigkeit des Sauerstoffs (Smith & Lambert [40]). Die letzte Spalte in Tabelle 4.1 zeigt die Häufigkeiten der Elemente He, C, O und N für C-Sterne auf dem AGB, die hier verwendet werden.

Die von Smith & Lambert [40] beobachteten Häufigkeiten liegen für Kohlenstoff bei $2.52{\cdot}10^{-4}$ und für Sauerstoff bei $5.50{\cdot}10^{-4}$. Diese beobachteten Werte stimmen hinreichend mit den skalierten Werten in Tabelle 4.1 überein. Die Häufigkeiten der leichten Elemente werden durch die Mischungsvorgänge nicht verändert. Für diese Elemente werden die normalen Häufigkeiten nach Anders & Grevesse [1], Grevesse & Noels [15] verwendet.

4.4.3 Berechnung der Molekülhäufigkeiten

Im Folgenden wird das hier verwendete Iterationsverfahren beschrieben. Tabelle 4.4.3 zeigt die in die Modellrechnungen einbezogenen Moleküle. Zur Berechnung der chemischen Zusammensetzung der Gasphase werden die Gleichungen für die wichtigsten Elemente zusammengestellt. Der in den Modellrechnungen untersuchte Temperaturbereich liegt zwischen 600 K und 1600 K. Das ist der Bereich, in dem sich die verschiedenen möglichen Festkörper bilden können. Zuerst betrachten wir den Fall, daß die Sauerstoffhäufigkeit größer als die Kohlenstoffhäufigkeit ist (Abb. 4.1 oben).

Sauerstoff: Die häufigsten O-haltigen Moleküle sind bei tieferen Temperaturen CO und H_2O, bei höheren Temperaturen auch freie O-Atome und OH. Dann gilt

$$\epsilon_{\mathrm{O}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{O}} + p_{\mathrm{OH}} + p_{\mathrm{H_2O}} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i \\ \text{mit O}}} j_i p_i \,. \tag{4.32}$$

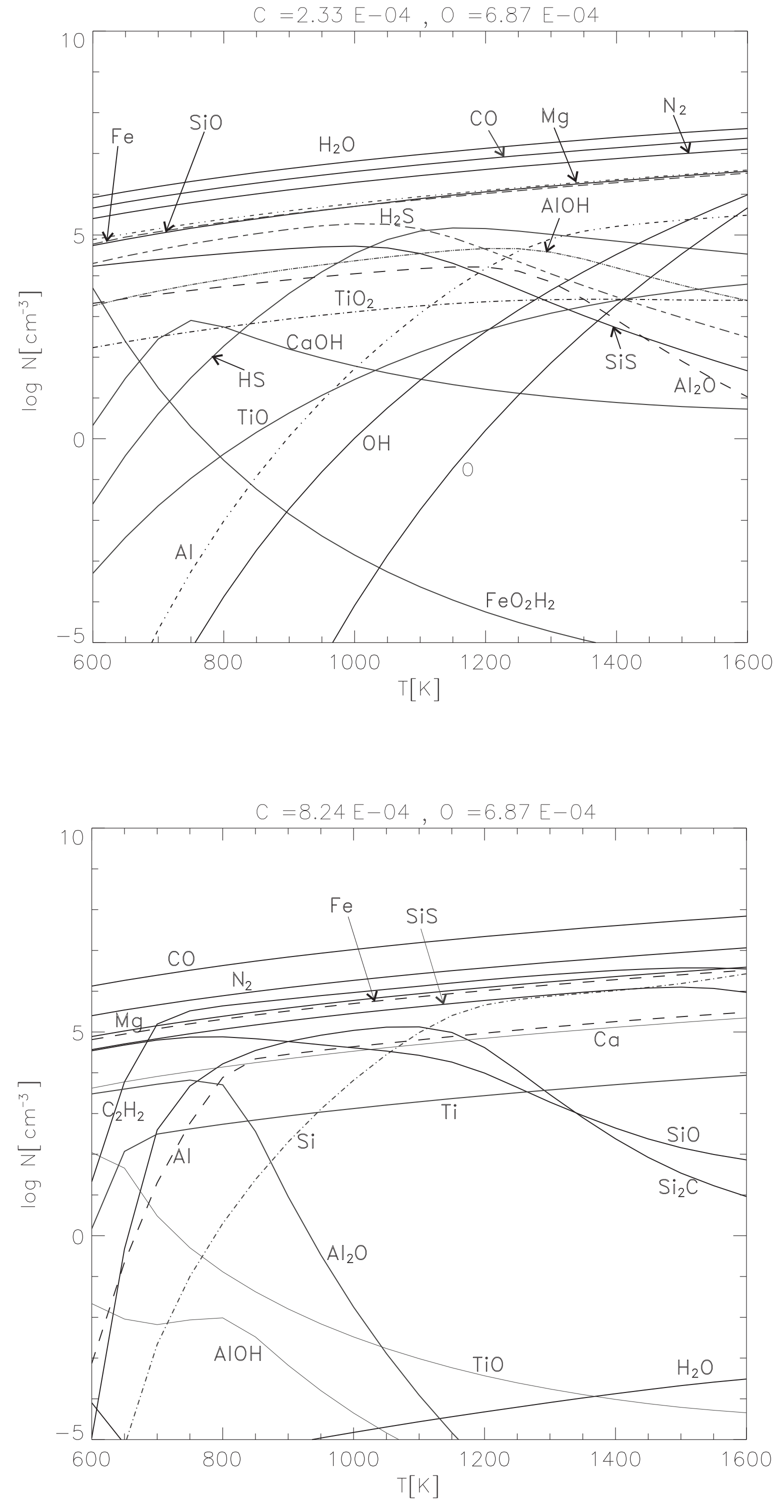


Abbildung 4.1 Temperaturabhängigkeit der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Elemente bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2} für eine sauerstoffreiche Mischung (oben) und für eine kohlenstoffreiche Mischung (unten).

Tabelle 4.3 Bei der Modellrechnung berücksichtigte Moleküle.

Element	Moleküle
H	H, H_2
C	C, CO, CH_4, C_2, C_2H, C_2H_2
O	O, OH, H_2O, 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
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

In der Summe sind alle anderen O-haltigen Moleküle zusammengefaßt, wie CO_2, SiO, AlO, usw. Nach Einsetzen des Massenwirkungsgesetzes für die Moleküle in (4.32) folgt für den Partialdruck der freien O-Atome

$$p_{\mathrm{O}} = \frac{\epsilon_{\mathrm{O}} P_{\mathrm{H}} - p_{\mathrm{CO}} - \sum j_i p_i}{1 + p_{\mathrm{H}} K_p(\mathrm{OH}) + p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{H_2O})} \,. \tag{4.33}$$

Da der Partialdruck des CO fast so groß wie der Partialdruck aller anderen sauerstoffhaltigen Moleküle ist, wird in der Gleichung nicht das Massenwirkungsgesetz eingesetzt. Für das CO-Molekül verwendet man im ersten Rechenschritt die Näherung

$$p_{\mathrm{CO}} = \epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} \tag{4.34}$$

und ab dem zweiten Iterationsschritt den nach

$$p_{\mathrm{CO}} = p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{CO}) \tag{4.35}$$

berechneten Partialdruck von CO unter Verwendung des Partialdrucks p_{C} aus dem vorangegangenen Iterationsschritt. Damit ist der Partialdruck p_{O} der freien Atome bekannt und kann in den weiteren Gleichungen verwendet werden.

Kohlenstoff: Die häufigsten Kohlenstoffmoleküle sind CO, HCN und C_2H_2. Dann gilt

$$\epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{HCN}} + 2p_{\mathrm{C_2H_2}} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i \\ \text{mit C}}} j_i p_i \,. \tag{4.36}$$

In der Summe sind alle anderen C-haltigen Moleküle zusammengefaßt, wie C_2, C_2H, CO_2, usw. Nach Einsetzen des Massenwirkungsgesetzes für die Moleküle in (4.36) ergibt sich

$$2p_{\mathrm{C}}^2 p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{C_2H_2}) + p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{CO}) + p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{H}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{HCN}) - \Big(\epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} - \sum_i j_i p_i\Big) = 0\,. \tag{4.37}$$

Das ist eine quadratische Gleichung für p_{C}. Sie wird durch

$$p_{\mathrm{C}} = A\Big(\sqrt{1+B} - 1\Big) \tag{4.38}$$

gelöst, mit

$$A = \frac{1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{CO}) + p_{\mathrm{H}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{HCN})}{4 p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{C_2H_2})} \tag{4.39}$$

$$B = \frac{8 p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{C_2H_2})\Big(\epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} - \sum_i j_i p_i\Big)}{\Big(1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{CO}) + p_{\mathrm{H}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{HCN})\Big)^2}\,. \tag{4.40}$$

Damit ist der Partialdruck p_{C} der freien Atome bekannt und kann in den weiteren Gleichungen verwendet werden.

Falls die Sauerstoffhäufigkeit geringer als die des Kohlenstoffs ist (Abb. 4.1 unten), ist bei der numerischen Berechnung die Reihenfolge der Gleichungen für p_{C} und p_{O} umzukehren. In diesem Fall wird in (4.36) für das CO-Molekül im ersten Rechenschritt die Näherung

$$p_{\mathrm{CO}} = \epsilon_{\mathrm{O}} P_{\mathrm{H}} \tag{4.41}$$

verwendet.

Bei gleicher Häufigkeit von Sauerstoff und Kohlenstoff (Abb. 4.2) ergibt sich ein Problem daraus, daß der Partialdruck von CO sehr viel größer ist als der aller anderen C- und O-haltigen Moleküle. Die Partialdrucke dieser Moleküle verschwinden dann in den numerischen Rundungsfehlern. Dieses Problem kann man durch eine einfache Umformung der beiden Gleichungen

$$\epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}}\Big(1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{CO}) + p_{\mathrm{H}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{HCN}) + \sum_{\mathrm{C}}\Big) \tag{4.42}$$

$$\epsilon_{\mathrm{O}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{O}}\Big(1 + p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{CO}) + p_{\mathrm{H}} K_p(\mathrm{OH}) + p_{\mathrm{H}}^2 K_p(\mathrm{H_2O}) + \sum_{\mathrm{O}}\Big)\,. \tag{4.43}$$

umgehen. Durch Subtraktion der Gleichung (4.42) von Gleichung (4.43) fällt der Term (4.35) weg. Nach Einsetzen von p_{O} aus (4.43) in die Differenz der Gleichungen ergibt sich eine quadratische Gleichung für p_{C}. Sie wird durch

$$p_{\mathrm{C}} = A\Big(\sqrt{1+B} - 1\Big) \tag{4.44}$$

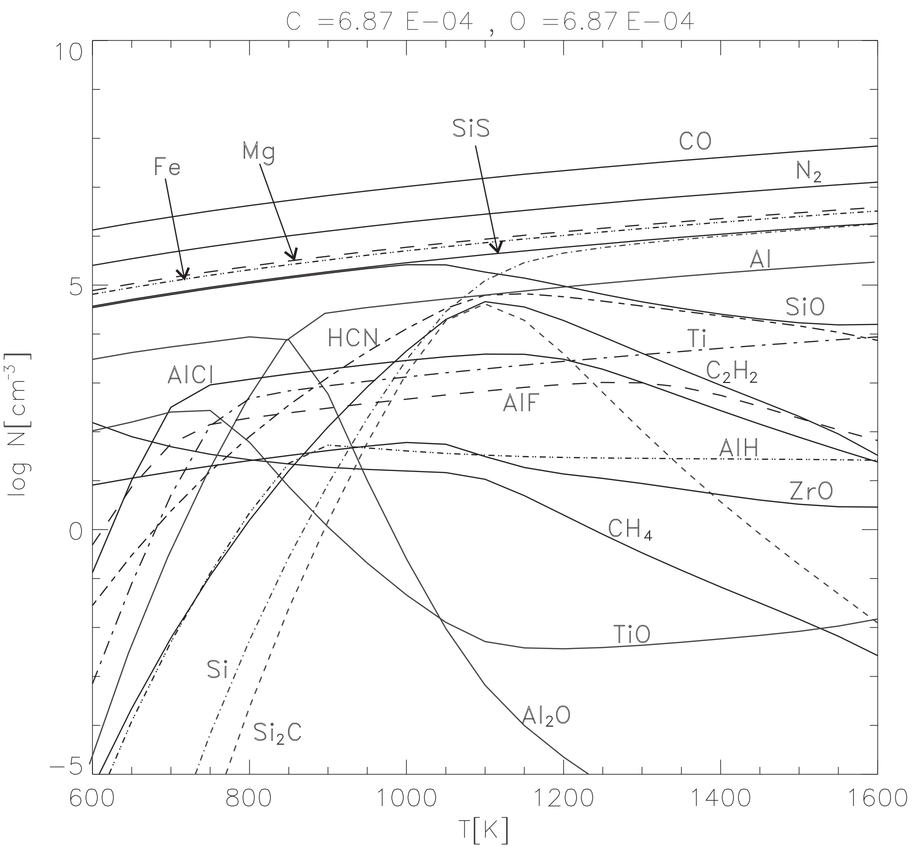


Abbildung 4.2 Temperaturabhängigkeit der Molekülhäufigkeiten der wichtigsten Elemente bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

gelöst, mit

$$A = \frac{\Upsilon_\mathrm{C}\Upsilon_\mathrm{O} - P_\mathrm{H}K_p(\mathrm{CO})\Big(\epsilon_\mathrm{C} - \epsilon_\mathrm{O}\Big)}{2K_p(\mathrm{CO})\Upsilon_\mathrm{C}} \tag{4.45}$$

$$B = \frac{4K_p(\mathrm{CO})\Upsilon_\mathrm{C}\Big(\epsilon_\mathrm{C}P_\mathrm{H}\Upsilon_\mathrm{O}\Big)}{\Big(\Upsilon_\mathrm{C}\Upsilon_\mathrm{O} - P_\mathrm{H}K_p(\mathrm{CO})\Big(\epsilon_\mathrm{C} - \epsilon_\mathrm{O}\Big)\Big)^2} \tag{4.46}$$

wobei

$$\Upsilon_\mathrm{C} = 1 + p_\mathrm{H}p_\mathrm{N}K_p(\mathrm{HCN}) + \sum_\mathrm{C} \tag{4.47}$$

$$\Upsilon_\mathrm{O} = 1 + p_\mathrm{H}K_p(\mathrm{OH}) + p_\mathrm{H}^2K_p(\mathrm{H_2O}) + \sum_\mathrm{O} \tag{4.48}$$

Damit ist der Partialdruck p_C bekannt, und es kann p_O aus (4.43) berechnet werden.

Silizium: Das Silizium kommt in der Gasphase als SiO-, SiC_2- und SiS-Molekül vor. Bei höheren Temperaturen muß auch das freie Atom berücksichtigt werden (vergl.

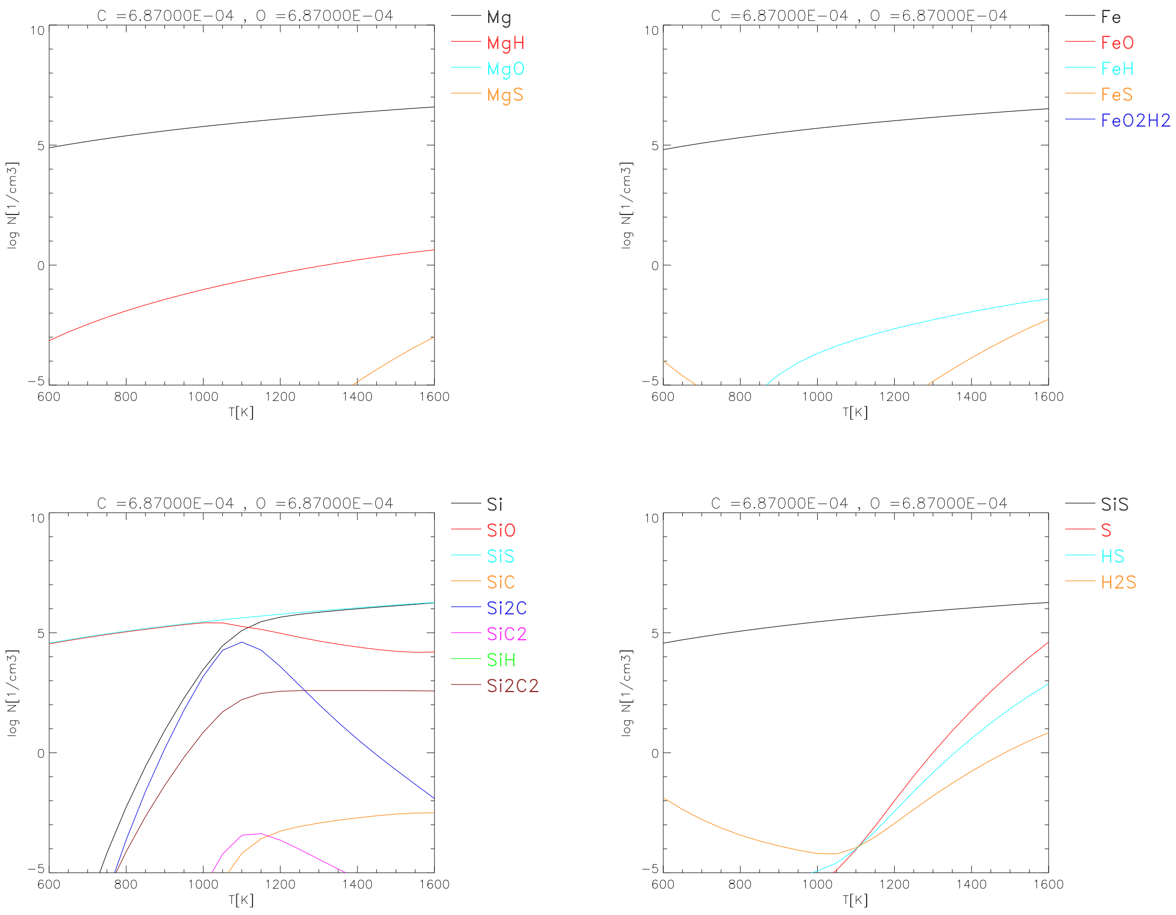


Abbildung 4.3 Temperaturabhängigkeit der Molekülhäufigkeiten von Magnesium (links oben), Eisen (rechts oben), Silizium (links unten) und Schwefel (rechts unten) bei einem Druck $P = 10^{-4}\mathrm{dyn\ cm}^{-2}$. S-Stern-Häufigkeiten.

Abb. 4.3). Dann gilt

$$\epsilon_{\mathrm{Si}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Si}} + p_{\mathrm{SiO}} + p_{\mathrm{SiS}} + 2p_{\mathrm{Si_2C}} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i \\ \text{mit Si}}} j_i p_i \,. \tag{4.49}$$

Nach Einsetzen der Massenwirkungsgesetze für die Moleküle ergibt sich

$$2p_{\mathrm{Si}}^2 p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{Si_2C}) + p_{\mathrm{Si}} + p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{SiO}) + p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{S}} K_p(\mathrm{SiS}) + \sum j_i p_i - \epsilon_{\mathrm{Si}} P_{\mathrm{H}} = 0 \,. \tag{4.50}$$

Das ist eine quadratische Gleichung für p_{Si}. Sie wird durch

$$p_{\mathrm{Si}} = A\Big(\sqrt{1+B} - 1\Big) \tag{4.51}$$

gelöst, mit

$$A = \frac{1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{SiO}) + p_{\mathrm{S}} K_p(\mathrm{SiS})}{4 p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{Si_2C})} \tag{4.52}$$

$$B = \frac{8p_{\mathrm{C}}K_p(\mathrm{Si_2C})\Big(\epsilon_{\mathrm{Si}}P_{\mathrm{H}} - \sum j_i p_i\Big)}{\Big(1 + p_{\mathrm{O}}K_p(\mathrm{SiO}) + p_{\mathrm{S}}K_p(\mathrm{SiS})\Big)^2} \,. \tag{4.53}$$

Magnesium und Eisen: Diese kommen in der Gasphase praktisch immer nur als freie Atome vor (vergl. Abb. 4.3). In diesem Fall ergibt sich

$$p_{\mathrm{Mg}} = \epsilon_{\mathrm{Mg}}P_{\mathrm{H}} - \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i\\ \text{mit Mg}}} j_i p_i \tag{4.54}$$

$$p_{\mathrm{Fe}} = \epsilon_{\mathrm{Fe}}P_{\mathrm{H}} - \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i\\ \text{mit Fe}}} j_i p_i \,. \tag{4.55}$$

Schwefel: Die häufigste Schwefelverbindung in der Gasphase ist SiS (vergl. Abb. 4.3). Es folgt

$$\epsilon_{\mathrm{S}}P_{\mathrm{H}} = P_{\mathrm{S}} + p_{\mathrm{SiS}} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i\\ \text{mit S}}} j_i p_i \,, \tag{4.56}$$

$$p_{\mathrm{S}} = \frac{\epsilon_{\mathrm{S}}P_{\mathrm{H}} - \sum_i j_i p_i}{1 + p_{\mathrm{S}}K_p(\mathrm{SiS})} \,. \tag{4.57}$$

Aluminium: Das Aluminium kommt in der Gasphase als freies Atom vor, bei niedrigen Temperaturen müssen auch Al_2O, AlCl und AlS berücksichtigt werden (vergl. Abb. 4.4). Dann gilt

$$\epsilon_{\mathrm{Al}}P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Al}} + 2p_{\mathrm{Al_2O}} + p_{\mathrm{AlCl}} + p_{\mathrm{AlS}} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i\\ \text{mit Al}}} j_i p_i \,. \tag{4.58}$$

Nach Einsetzen der Massenwirkungsgesetze für die Moleküle ergibt sich

$$2p_{\mathrm{Al}}^2 p_{\mathrm{O}}K_p(\mathrm{Al_2O}) + p_{\mathrm{Al}} + p_{\mathrm{Al}}p_{\mathrm{Cl}}K_p(\mathrm{AlCl}) + p_{\mathrm{Al}}p_{\mathrm{S}}K_p(\mathrm{AlS}) + \sum j_i p_i - \epsilon_{\mathrm{Al}}P_{\mathrm{H}} = 0 \,. \tag{4.59}$$

Das ist eine quadratische Gleichung für p_{Al}. Sie wird durch

$$p_{\mathrm{Al}} = A\Big(\sqrt{1+B} - 1\Big) \tag{4.60}$$

gelöst, mit

$$A = \frac{1 + p_{\mathrm{Cl}}K_p(\mathrm{AlCl}) + p_{\mathrm{S}}K_p(\mathrm{AlS})}{4p_{\mathrm{O}}K_p(\mathrm{Al_2O})} \tag{4.61}$$

$$B = \frac{8p_{\mathrm{O}}K_p(\mathrm{Al_2O})\Big(\epsilon_{\mathrm{Al}}P_{\mathrm{H}} - \sum j_i p_i\Big)}{\Big(1 + p_{\mathrm{Cl}}K_p(\mathrm{AlCl}) + p_{\mathrm{S}}K_p(\mathrm{AlS})\Big)^2} \,. \tag{4.62}$$

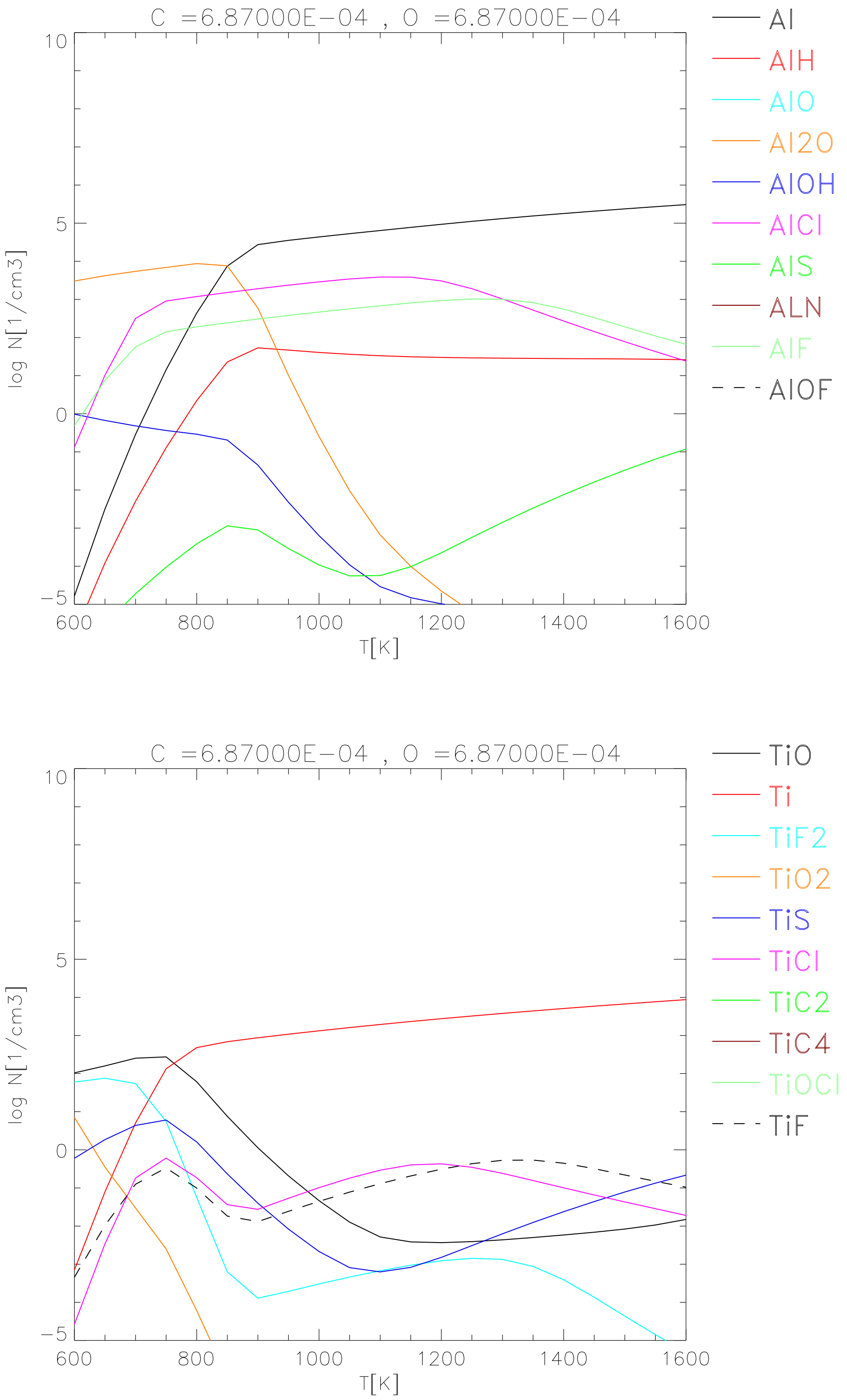


Abbildung 4.4 Temperaturabhängigkeit der Molekülhäufigkeiten von Aluminium (oben) und Titan (unten) bei einem Druck $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

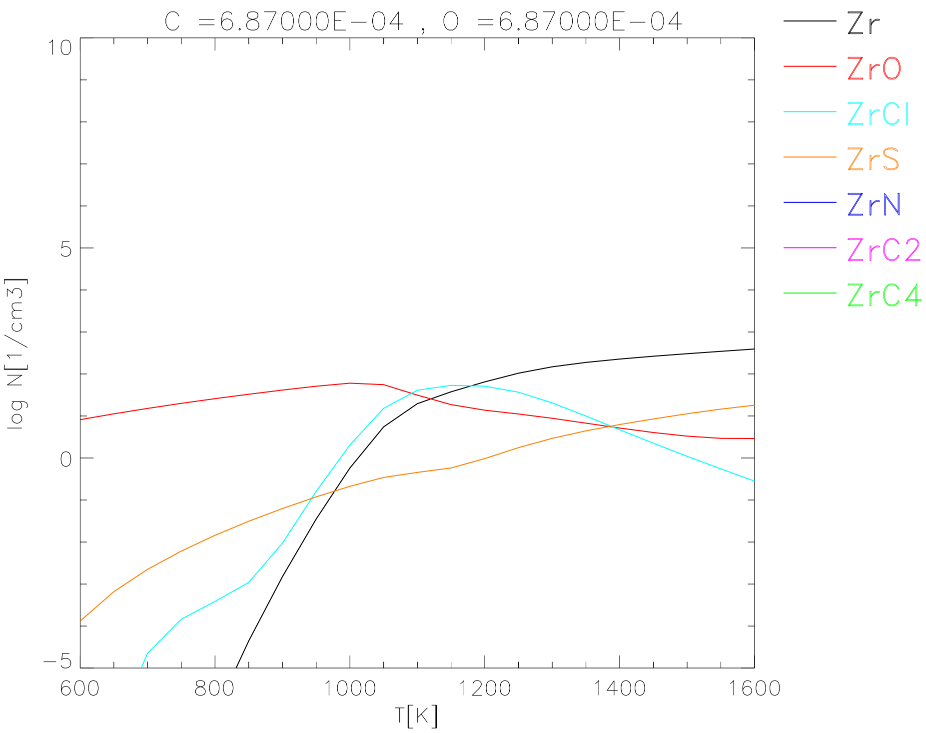


Abbildung 4.5 Temperaturabhängigkeit der Molekülhäufigkeiten von Zirkon bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

Damit ist der Partialdruck $p_{\rm Al}$ der freien Al-Atome bekannt und kann in den weiteren Gleichungen verwendet werden.

Titan: Das Titan kommt in der Gasphase als freies Atom vor. Bei tiefen Temperaturen muß auch das TiO berücksichtigt werden (vergl. Abb. 4.4). Dann gilt

$$\epsilon_{\rm Ti} P_{\rm H} = p_{\rm Ti} + p_{\rm TiO} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i \\ \text{mit Ti}}} j_i p_i \ . \tag{4.63}$$

Nach Einsetzen der Massenwirkungsgesetze für die Moleküle in (4.63) folgt für den Partialdruck $p_{\rm Ti}$

$$p_{\rm Ti} = \frac{\epsilon_{\rm Ti} P_{\rm H} - \sum_i j_i p_i}{1 + p_{\rm O} K_p({\rm TiO})} \ . \tag{4.64}$$

Damit ist der Partialdruck $p_{\rm Ti}$ der freien Ti-Atome bekannt und kann in den weiteren Gleichungen verwendet werden.

Zirkon: Das häufigste zirkonhaltige Molekül ist ZrO, bei höheren Temperaturen muß auch das freie Atom berücksichtigt werden (vergl. Abb. 4.5). Dann gilt

$$\epsilon_{\rm Zr} P_{\rm H} = p_{\rm Zr} + p_{\rm ZrO} + \sum_{\substack{\text{sonstige Moleküle } i \\ \text{mit Zr}}} j_i p_i \ . \tag{4.65}$$

Nach Einsetzen der Massenwirkungsgesetze für die Moleküle in (4.65) folgt für den Partialdruck p_{Zr}

$$p_{\mathrm{Zr}} = \frac{\epsilon_{\mathrm{Zr}} P_{\mathrm{H}} - \sum_i j_i p_i}{1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{ZrO})} \,. \tag{4.66}$$

Damit ist der Partialdruck p_{Zr} der freien Zr-Atome bekannt und kann in den weiteren Gleichungen verwendet werden.

Zum Start der Berechnung der Zusammensetzung der Gasphase setzt man in allen Gleichungen für die Partialdrucke der freien Atome die Summe $\sum_i j_i p_i$ gleich null. Ist die Häufigkeit von Sauerstoff größer als die von Kohlenstoff, verwendet man beim Start der Rechnung für CO die Näherung (4.34). Ist anderenfalls die Sauerstoffhäufigkeit kleiner als die Kohlenstoffhäufigkeit, verwendet man beim Start der Rechnung die Näherung (4.41). Dann berechnet man nach (4.33), ..., (4.66) die Partialdrucke der freien Atome. Anschließend berechnet man die Partialdrucke aller Moleküle, die in den Summen zusammengefaßt sind. Für jedes Element muß für die Änderung des Partialdrucks ab dem zweiten Iterationsschritt die Bedingung

$$\left| \frac{p_{\mathrm{neu}} - p_{\mathrm{alt}}}{p_{\mathrm{alt}}} \right| < \epsilon \tag{4.67}$$

mit einer Fehlerschranke $\epsilon = 10^{-6}$ überprüft werden. Falls diese Bedingung nicht erfüllt ist, fängt man einen neuen Iterationsschritt wieder mit der Berechnung der Partialdrucke der freien Atome an, anderenfalls ist man fertig.

5. Kondensation fester Substanzen

Jetzt betrachten wir den Fall, daß außer der Gasphase auch Kondensate auftreten. In kosmischen Objekten sind die Temperatur-Druck-Verhältnisse so beschaffen, daß es außer auf Planetenoberflächen keine Flüssigkeiten gibt. Alle Stoffe sind entweder gasförmig oder zu Festkörpern kondensiert.

5.1 Heterogene Gleichgewichte

In der physikalischen Chemie wird gezeigt (s. Moore [30], Atkins [2]), daß die Gleichgewichtsbedingung

$$\sum_i \mu_i \, \nu_i = 0 \tag{5.1}$$

in einem Gemisch, in dem mehrere verschiedene Phasen nebeneinander existieren, auf ein Gesetz der Form (4.23) führt. Für die Reaktion

$$i \cdot A + j \cdot B + ... \longrightarrow n \cdot C + k \cdot D + ... \tag{5.2}$$

ergibt sich als Gleichgewichtsbedingung

$$\frac{a_C^n \cdot a_D^k \cdot ...}{a_A^i \cdot a_B^j \cdot ...} = e^{-\sum_i \Delta G_i/RT} = K_p(T) \quad \text{(Massenwirkungsgesetz)} \tag{5.3}$$

wobei a_i die Aktivitäten der Stoffe $A, B, C, ...$ sind. Die Aktivitäten sind definiert als Logarithmus der Änderung des chemischen Potentials zwischen dem Zustand mit dem tatsächlichen Druck und dem Zustand mit dem Referenzdruck.

Für ideale Gase sind die Aktivitäten gerade gleich dem Partialdruck, gemessen in Einheiten des Referenzdrucks

$$a_i = \frac{p_i}{p_0} \ . \tag{5.4}$$

Für Festkörper ist im chemischen Gleichgewicht

$$a_i = 1 \ . \tag{5.5}$$

Berechnet man für eine gegebene Gasmischung, die für sich im chemischen Gleichgewicht ist, die Aktivität einer festen Substanz für ein heterogenes Gemisch aus Gas und Festkörpern nach dem Massenwirkungsgesetz (5.3), dann gilt

- $a_i = 1 \Longrightarrow$ es herrscht Gleichgewicht und der Festkörper koexistiert mit der Gasphase.
- $a_i < 1 \Longrightarrow$ der Festkörper reagiert mit den Gaskomponenten in Richtung auf den Abbau der Substanz (Sublimation).
- $a_i > 1 \Longrightarrow$ die Gaskomponenten reagieren in Richtung auf die Bildung des Festkörpers (Kondensation).

Mit der Berechnung der Aktivität kann man feststellen, ob bestimmte feste Stoffe aus einer gegebenen Gasmischung auskondensieren können. Wenn die Aktivität größer als eins ist, dann kann die Substanz im chemischen Gleichgewicht kondensieren. Ist die Aktivität kleiner als eins, dann kondensiert die Substanz nicht.

5.2 Kondensationssequenzen

Man betrachtet ein Gas mit einer vorgegebenen Mischung von Elementen mit gegebener Temperatur und gegebenem Druck. Die chemische Zusammensetzung der Gasphase liefert die Partialdrucke der freien Atome und Moleküle. Man betrachtet die Bildung eines Stoffes aus den freien Atomen

$$i \cdot A + j \cdot B + ... \longrightarrow A_i B_j ...(s) \ . \tag{5.6}$$

Das Massenwirkungsgesetz für diese Reaktion lautet

$$a_{A_i B_j ...} = p_A^i p_B^j ... \cdot K_p(T) \ . \tag{5.7}$$

Ist die hiernach berechnete Aktivität einer Substanz in dem Gemisch größer oder gleich eins, so kann diese Substanz im chemischen Gleichgewicht gebildet werden.

$$\boxed{a_{A_i B_j} ... \geq 1 \Longleftrightarrow \text{Kondensation} \ .} \tag{5.8}$$

Die Konstante $K_p(T)$ ist gegeben durch

$$K_p(T) = e^{-\Delta G / RT} \tag{5.9}$$

mit

$$\Delta G = G(A_{\text{fest}}) - G(A_{\text{gas}}) = H(A_{\text{fest}}) - H(A_{\text{gas}}) - T\big(S(A_{\text{fest}}) - S(A_{\text{gas}})\big) \ . \tag{5.10}$$

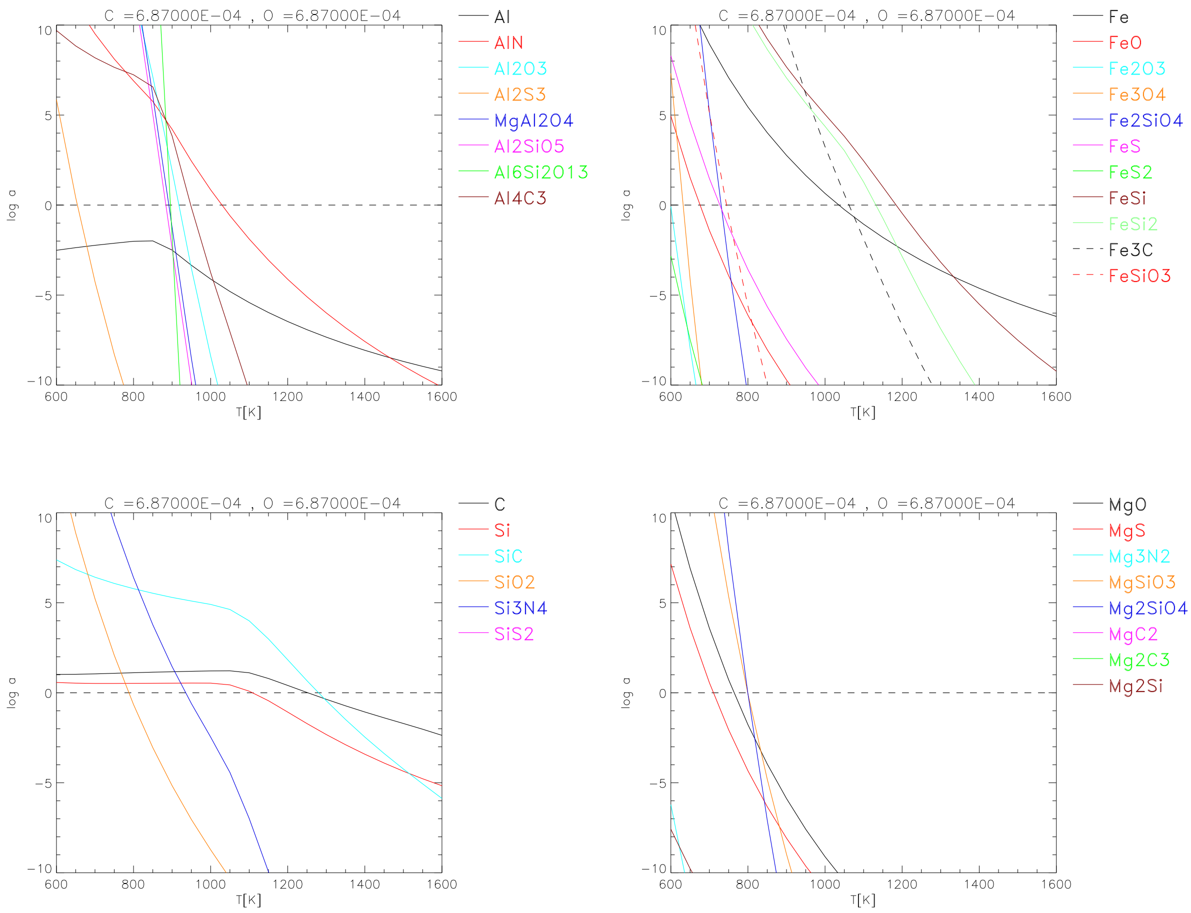
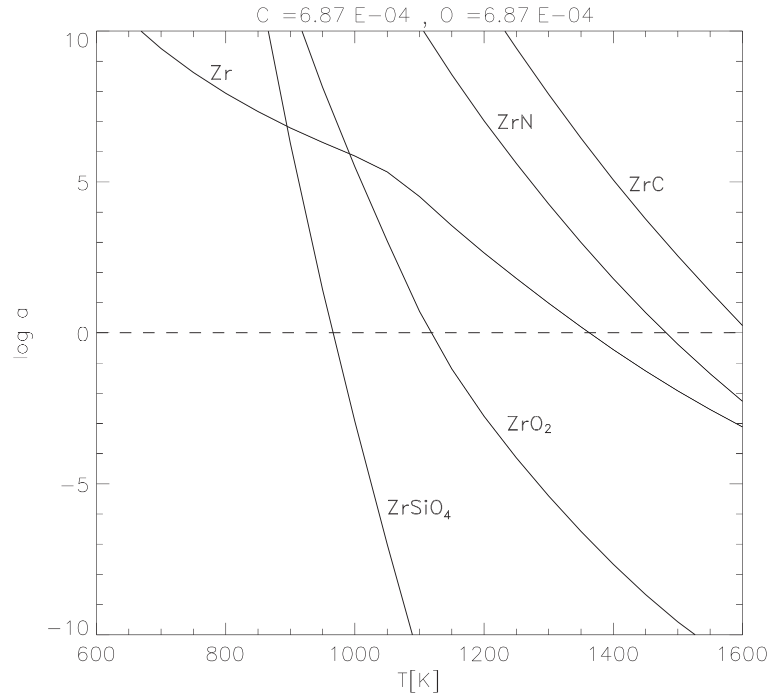


Abbildung 5.1 Temperaturabhängigkeit der Aktivitäten von festen Aluminium- (links oben), Eisen- (rechts oben), Silizium- (links unten) und Magnesiumverbindungen (rechts unten) bei einem Druck $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

Hier ist ΔG die freie Enthalpie der Bildung der festen Substanz aus den freien Atomen. Diese muß aus gemessenen Bildungsenergien und der spezifischen Wärme berechnet werden. Dies ist für eine große Zahl von Materialien durchgeführt worden und die Ergebnisse stehen in Form von Tabellen oder Polynomfits für ΔG zur Verfügung. Die in dieser Arbeit verwendeten Polynomapproximationen stammen aus Sharp und Hübner [39]. Diese wurden für eine Anzahl zusätzlicher Kondensate durch Polynomapproximationen ergänzt, die nach der Methode der kleinsten Quadrate unter Verwendung von thermodynamischen Daten aus den JANAF-Tafeln [43] und aus Binnewies [5] bestimmt wurden. Diese Polynome für ΔG sind in den Tabellen in Anhang B.2 und B.1 aufgelistet.

Die Aktivitäten wurden für ca. 90 verschiedene Stoffe der Elemente C, Si, Mg, Fe, Al, Ca, Na, Ni, Cr, Mn, K, V, Ti und Zr im Temperaturbereich zwischen 600 K und 1600 K entsprechend (5.7) berechnet. Einige Beispiele sind in Abb. 5.1 und 5.2 für eine Isobare mit $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} zu sehen. Dies entspricht dem typischen Druck in der Kondensationszone einer zirkumstellaren Hülle.

Wenn die Kurve der Aktivität die horizontale Gerade $a(T) = 1$ schneidet, dann kann



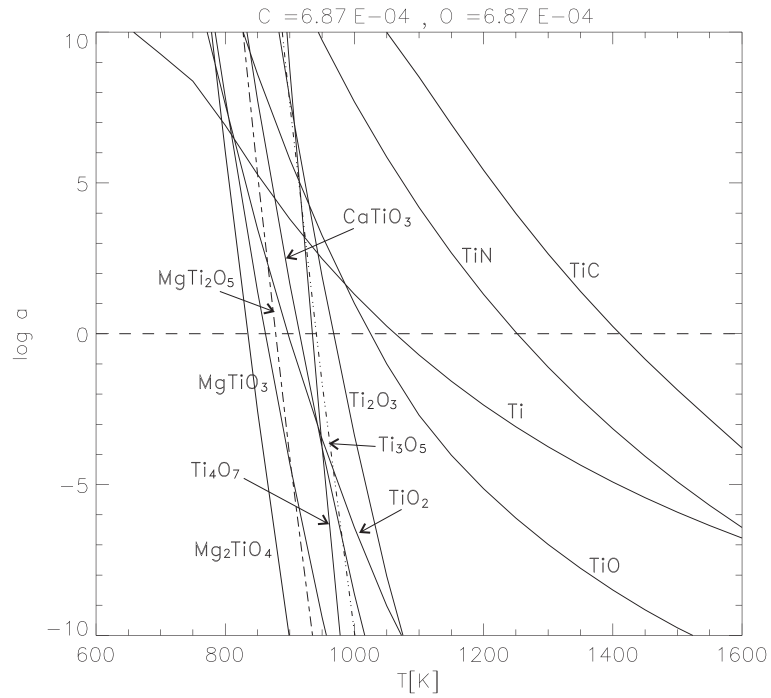


Abbildung 5.2 Temperaturabhängigkeit der Aktivitäten von festen Zirkon- (oben) und Titanverbindungen (unten) bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

Tabelle 5.1 Wichtigste Kondensate, die in den verschiedenen Sterntypen auftreten. M- und C-Sterne nach Lattimer et al. [21], S-Sterne: diese Arbeit.

M-Sterne	S-Sterne	C-Sterne
Fe	Fe	C
Mg_2SiO_4	SiC	TiC
Mg_2SiO_3	FeSi	SiC
$MgAl_2O_4$	AlN	Fe
Al_2O_3	Al_2O_3	CaS
$CaTiO_3$	TiC	AlN
$MgSiC_2SiO_7$		Al_2O_3
$CaAl_2Si_2O_8$		Al_2SiO_5
$CaMgSi_2O_6$		$MgAl_2O_4$
$CaTiSiO_5$		Mg_2SiO_4
Al_2SiO_5		
TiO_2		

der Stoff ab der Temperatur des Schnittpunkts auskondensieren. Existiert bei einem Element für mehrere verschiedene Stoffe ein solcher Schnittpunkt, dann wird in einem abkühlenden Gas derjenige feste Stoff gebildet, der bei der höchsten Temperatur als erster $a(T) = 1$ erreicht. Ab diesem Punkt beginnt der Stoff zu kondensieren, wobei danach immer soviel Material aus der Gasphase entfernt wird, daß bei der weiteren Abkühlung des Systems für diese Substanz die Aktivität gleich eins bleibt. Falls bei einer niedrigeren Temperatur dann für einen anderen Stoff $a > 1$ wird, dann wandelt sich das erste Kondensat in das zweite Kondensat um, das bei tieferen Temperaturen dann das stabilere ist, usw. Auf diese Weise kann man bestimmen, welche Stoffe mit abnehmender Temperatur nacheinander auftreten.

Diese Art von Rechnungen für Kondensationssequenzen sind vor allem im Zusammenhang mit der Frage der Entstehung des Planetensystems vielfach durchgeführt worden. Wichtige Arbeiten für die solare Elementmischung sind die von Grossman [16], Saxena & Eriksson [33], Sharp & Huebner [39] und Lattimer et al. [21]. Für kohlenstoffreiche Mischung sind die Arbeiten von Lattimer et al. [21] und Lodders & Fegley [24] zu nennen. Einige Ergebnisse sind in Tabelle 5.1 dargestellt.

Bis jetzt wurde jedoch noch nicht untersucht, welche Kondensate im Fall der S-Sterne entstehen können. Die Bestimmung der Kondensate mit der größten Häufigkeit ist bei S-Sternen wichtig, da diese einen Sternwind besitzen, in dem Festkörper auskondensieren können. Wegen der fast gleich großen Häufigkeit von C und O können in diesen aber weder Silikate (wie bei M-Sternen) noch Ruß (wie bei C-Sternen) gebildet werden. Ein Ziel dieser Arbeit ist es festzustellen, aus welchen Festkörpern der Staub bei S-Sternen besteht.

Eine qualitative Information darüber erhält man aus den Diagrammen für die Aktivitäten. Die Aktivitätskurven mit dem größten a bei einem gegebenen T definieren das stabilste Kondensat. In Abb. 5.1 läßt sich erkennen, daß für die Elementmischung in S-Sternen die in Tabelle 5.1 genannten Verbindungen die Kondensate mit der größten Häufigkeit oder der höchsten Kondensationstemperatur sind. Zu bemerken ist, daß in S-Sternen Magnesiumverbindungen nicht oder erst bei niedrigeren Temperaturen als bei den anderen Kondensaten zu erwarten sind (Abb. 5.1 rechts unten).

Für die in Tabelle 5.1 genannten Stoffe müssen zum Zweck einer Modellrechnung die Kondensationsgrade in Abhängigkeit von P, T und dem Verhältnis der Häufigkeiten $\epsilon_{\mathrm{C}}/\epsilon_{\mathrm{O}}$ bestimmt werden. Zusätzlich werden noch die Kondensate einiger Elemente mit geringeren Elementhäufigkeiten untersucht, die aber bereits bei sehr hoher Temperatur zu kondensieren beginnen, da diese eventuell als Kondensationskeime für die häufigeren Kondensate dienen können. Dies sind TiC und ZrC.

5.3 Berechnung des heterogenen Gleichgewichts

Im Folgenden werden die Gleichungen für die wichtigsten Kondensate bei S-Stern-Häufigkeiten, die in einem Temperaturbereich zwischen 600 K und 1600 K und bei einem Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} existieren, zusammengestellt.

Kondensation von FeSi: Von den Elementen mit der größten Häufigkeit kondensiert dieser Stoff bei der höchsten Temperatur (s. Abb. 5.1 rechts oben). Für die Aktivität von FeSi gilt

$$a_{\mathrm{FeSi}} = p_{\mathrm{Fe}} p_{\mathrm{Si}} K_p(\mathrm{FeSi}) \ . \tag{5.11}$$

Ab der Temperatur T_{c}, bei der $a_{\mathrm{FeSi}}(T) = 1$ wird, gilt für alle Temperaturen $T < T_{\mathrm{c}}$ die Gleichung (5.11) mit $a = 1$ (s.Abb. 5.3 unten)

$$1 = p_{\mathrm{Fe}} p_{\mathrm{Si}} K_p(\mathrm{FeSi}) \ . \tag{5.12}$$

Wenn der Bruchteil f_{FeSi} des Eisens im FeSi gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{FeSi}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase modifiziert man die Gleichungen (4.49) und (4.55) wie folgt

$$\left(\epsilon_{\mathrm{Si}} - f_{\mathrm{FeSi}} \epsilon_{\mathrm{Fe}}\right) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Si}} + p_{\mathrm{SiO}} + p_{\mathrm{SiS}} + ... \tag{5.13}$$

$$\left(1 - f_{\mathrm{FeSi}}\right) \epsilon_{\mathrm{Fe}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Fe}} + ... \tag{5.14}$$

Die $K + 1$ Gleichungen für die Gasphasenchemie müssen dann um die Gleichung (5.12) für das Gleichgewicht zwischen der Gasphase und FeSi erweitert werden, wobei man dann als zusätzliche Unbekannte f_{FeSi} hat. Insgesamt hat man dann $K + 2$ Gleichungen für die $K + 2$ Unbekannten. Dieses Gleichungssystem läßt sich wie in §4.4 iterativ lösen. Dies legt fest, wieviel Eisen im FeSi gebunden ist.

Die Aktivitäten der eisenhaltigen Kondensate, die sich bei Lösung der Gleichungen für die Chemie unter Berücksichtigung der Kondensation von FeSi ergeben, sind in Abb. 5.3 (unten) dargestellt. Daraus erkennt man, daß bei niedrigen Temperaturen auch Fe kondensiert.

Kondensation von Fe: Eisen kondensiert nach FeSi bei der zweithöchsten Temperatur (s. Abb. 5.3 unten). Für die Aktivität von Fe gilt

$$a_{\mathrm{Fe}} = p_{\mathrm{Fe}} K_p(\mathrm{Fe}) \ . \tag{5.15}$$

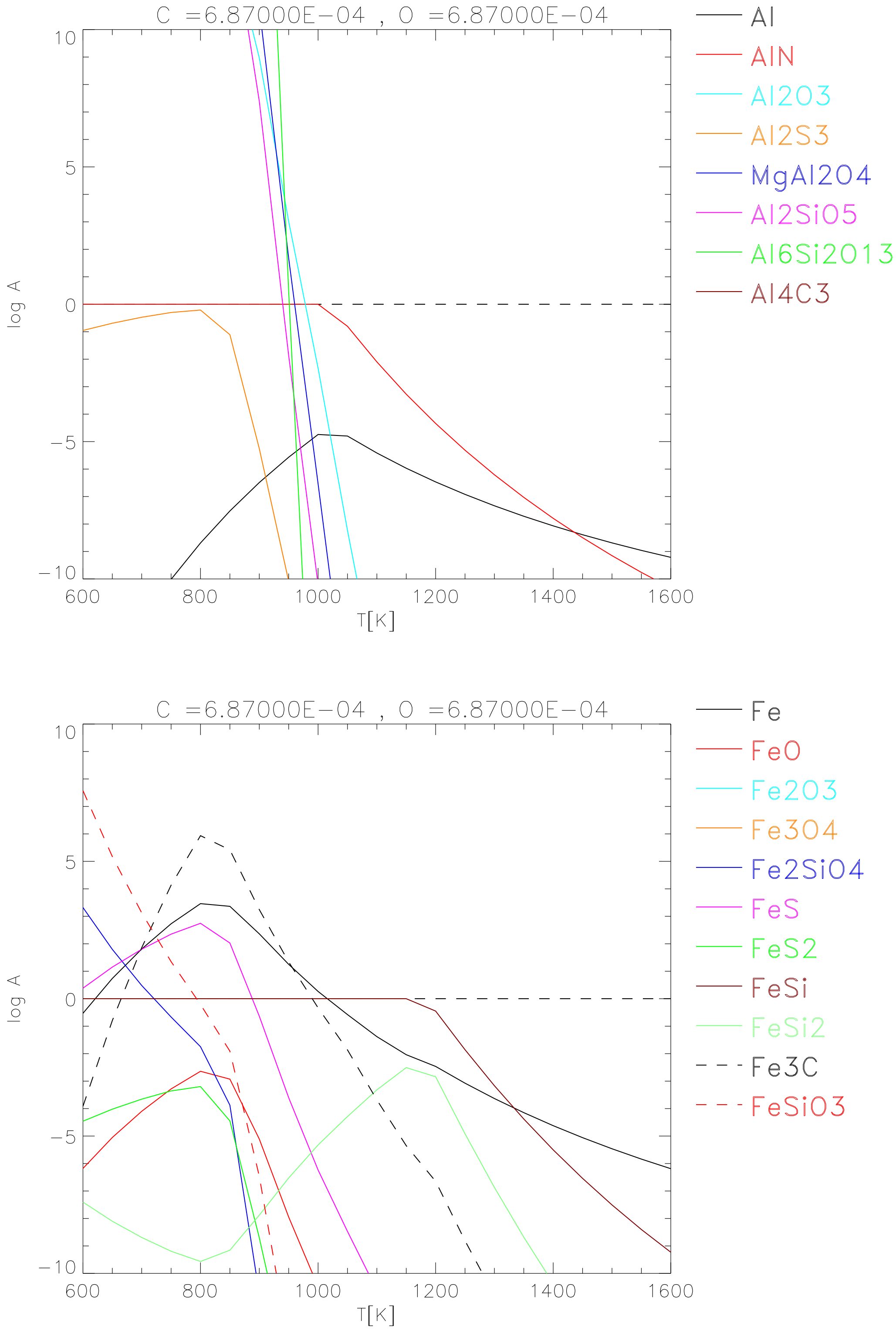


Abbildung 5.3 Kondensation von AlN (oben), FeSi (unten) bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt

$$1 = p_{\mathrm{Fe}} K_p(\mathrm{Fe}) \ . \tag{5.16}$$

Wenn der Bruchteil f_{Fe} des Eisens im metallischen Fe gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{Fe}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt Gleichung (5.13) für Silizium und analog zu vorher für Eisen

$$\big(1 - f_{\mathrm{FeSi}} - f_{\mathrm{Fe}}\big) \epsilon_{\mathrm{Fe}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Fe}} + ... \tag{5.17}$$

Kondensation von SiC: Auch SiC kommt als Kondensat bei hoher Temperatur in Frage (s. Abb. 5.1 links unten). Für die Aktivität von SiC gilt

$$a_{\mathrm{SiC}} = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{SiC}) \ . \tag{5.18}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt

$$1 = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{SiC}) \ . \tag{5.19}$$

Wenn der Bruchteil f_{SiC} des Siliziums im SiC gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{SiC}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\big(\epsilon_{\mathrm{C}} - f_{\mathrm{TiC}} \epsilon_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{ZrC}} \epsilon_{\mathrm{Zr}} - f_{\mathrm{CV_2}} \epsilon_{\mathrm{V}} - f_{\mathrm{SiC}} \epsilon_{\mathrm{Si}}\big) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.20}$$

$$\big((1 - f_{\mathrm{SiC}}) \epsilon_{\mathrm{Si}} - f_{\mathrm{FeSi}} \epsilon_{\mathrm{Fe}}\big) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Si}} + p_{\mathrm{SiO}} + p_{\mathrm{SiC}} + ... \tag{5.21}$$

Kondensation von Graphit: Um den Übergang von den S- zu den C-Sternen zu erfassen, muß auch die Kondensation von Kohlenstoff berücksichtigt werden. Für die Aktivität von Graphit gilt

$$a_{\mathrm{C}} = p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{C}) \ . \tag{5.22}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt

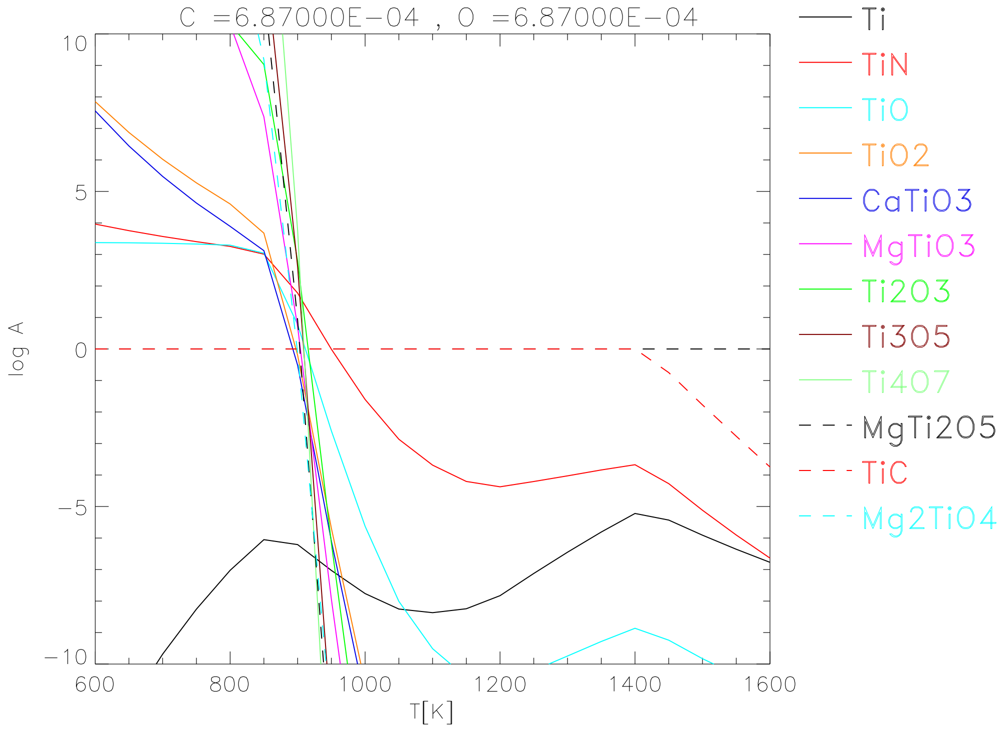
$$1 = p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{C}) \ . \tag{5.23}$$

Wenn der Bruchteil f_{C} des Kohlenstoffs im Graphit gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{C}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\big(1 - f_{\mathrm{C}}\big) \epsilon_{\mathrm{C}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.24}$$

Kondensation von AlN: Von den Elementen mit etwas niedrigerer Häufigkeit, die für die Bildung sekundärer Staubkomponenten in Frage kommen, wie z.B. Al und Ca, hat die Verbindung AlN die höchste Kondensationstemperatur (s. Abb. 5.1 links oben). Für die Aktivität von AlN gilt

$$a_{\mathrm{AlN}} = p_{\mathrm{Al}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{AlN}) \ . \tag{5.25}$$



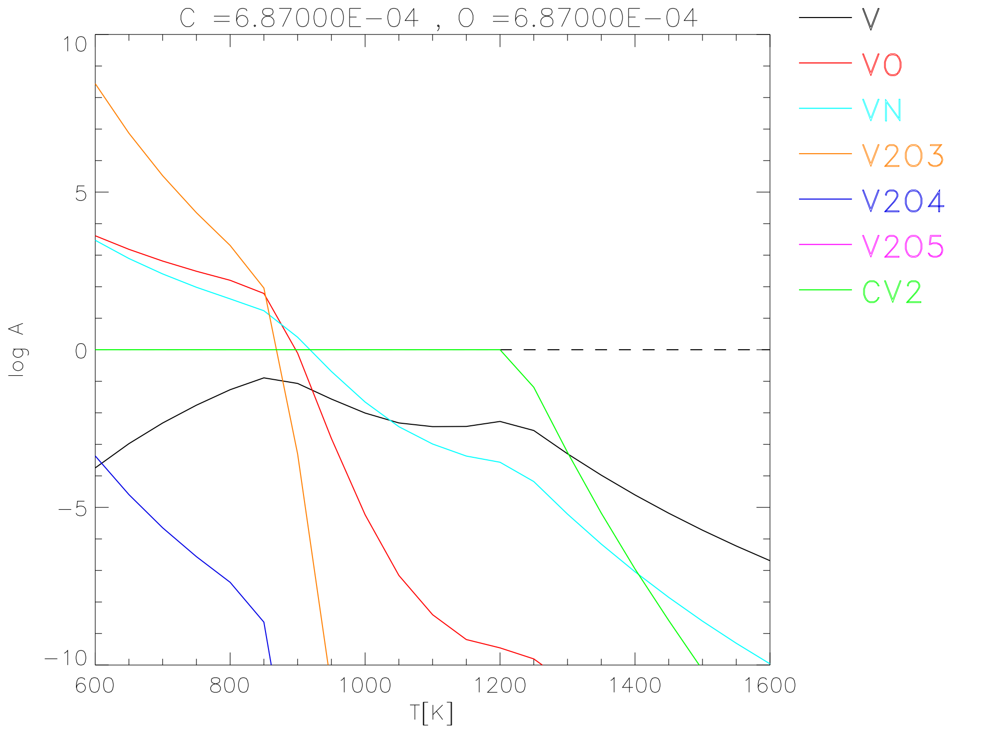


Abbildung 5.4 Kondensation von TiC (oben) und CV_2 (unten) bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}. S-Stern-Häufigkeiten.

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt (s.Abb. 5.3 oben)

$$1 = p_{\mathrm{Al}} p_{\mathrm{N}} K_p(\mathrm{AlN}) \ . \tag{5.26}$$

Wenn der Bruchteil f_{AlN} des Aluminiums im AlN gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{AlN}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\big(\epsilon_{\mathrm{N}} - f_{\mathrm{AlN}} \epsilon_{\mathrm{Al}}\big) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{N}} + p_{\mathrm{NH_3}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.27}$$

$$\big(1 - f_{\mathrm{AlN}}\big) \epsilon_{\mathrm{Al}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Al}} + p_{\mathrm{AlCl}} + p_{\mathrm{AlS}} + ... \tag{5.28}$$

Die Aktivitäten der aluminiumhaltigen Kondensate, die sich bei der Lösung der Gleichungen für die Chemie unter Berücksichtigung der Kondensation von AlN ergeben, sind in Abb. 5.3 (oben) dargestellt. Daraus erkennt man, daß sich AlN bei niedrigeren Temperaturen in Al_2O_3 umwandelt.

Kondensation von CaS: Für die Aktivität von CaS gilt

$$a_{\mathrm{CaS}} = p_{\mathrm{Ca}} p_{\mathrm{S}} K_p(\mathrm{CaS}) \ . \tag{5.29}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt

$$1 = p_{\mathrm{Ca}} p_{\mathrm{S}} K_p(\mathrm{CaS}) \ . \tag{5.30}$$

Wenn der Bruchteil f_{CaS} des Kalziums im CaS gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{CaS}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\big(\epsilon_{\mathrm{S}} - f_{\mathrm{CaS}} \epsilon_{\mathrm{Ca}}\big) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{S}} + p_{\mathrm{SiS}} + ... \tag{5.31}$$

$$\big(1 - f_{\mathrm{CaS}}\big) \epsilon_{\mathrm{Ca}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Ca}} + p_{\mathrm{CaCl}} + p_{\mathrm{CaS}} + ... \tag{5.32}$$

Kondensation von TiC: Unter den selteneren Elementen kommen Verbindungen von Ti, Zr und V als mögliche Keimbildner für die häufigeren Staubsorten in Frage, da von diesen Elementen kondensierte Stoffe mit außergewöhnlich hohen Verdampfungstemperaturen existieren. Für die Aktivität von TiC gilt

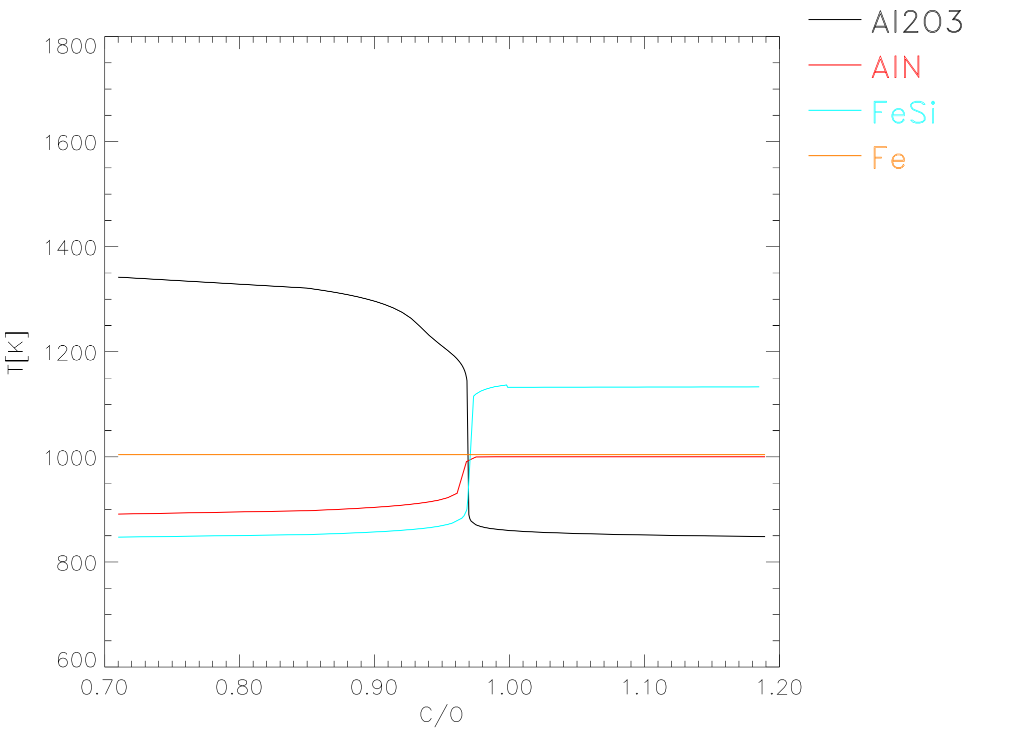
$$a_{\mathrm{TiC}} = p_{\mathrm{Ti}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{TiC}) \ . \tag{5.33}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_c gilt (s.Abb. 5.4 oben)

$$1 = p_{\mathrm{Ti}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{TiC}) \ . \tag{5.34}$$

Wenn der Bruchteil f_{TiC} des Titans im TiC gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{TiC}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\big(\epsilon_{\mathrm{C}} - f_{\mathrm{TiC}} \epsilon_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{ZrC}} \epsilon_{\mathrm{Zr}} - f_{\mathrm{CV_2}} \epsilon_{\mathrm{V}} - f_{\mathrm{SiC}} \epsilon_{\mathrm{Si}}\big) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.35}$$



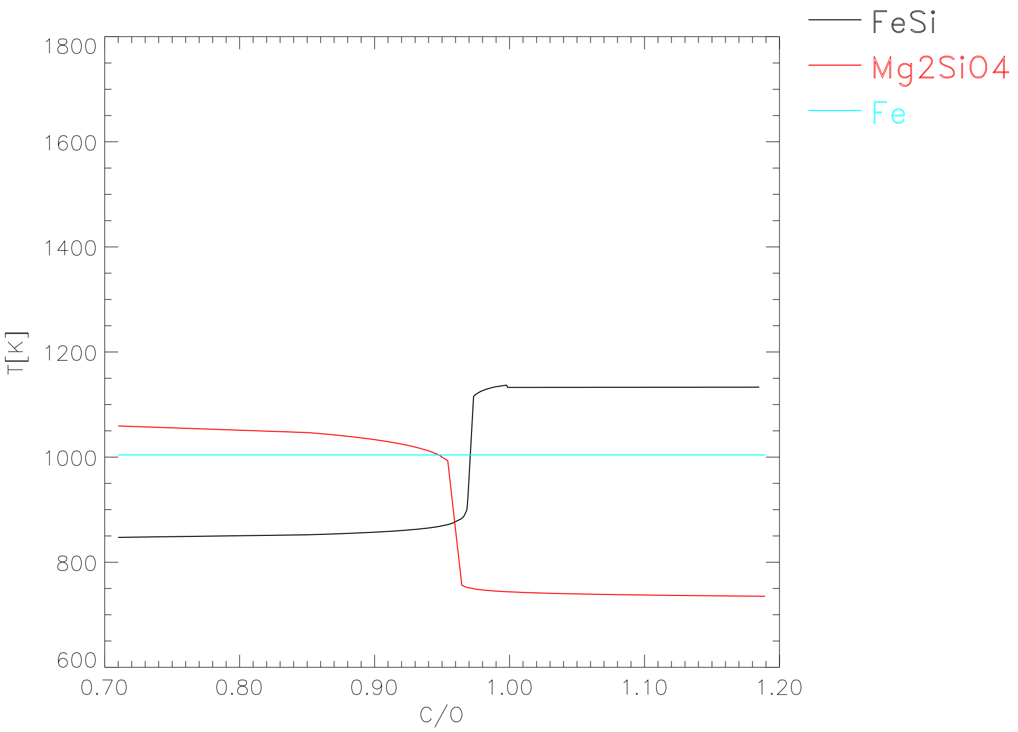


Abbildung 5.5 Stabilitätsgrenze der wichtigsten Kondensate, bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}.

$$\left(1 - f_{\mathrm{TiC}}\right)\epsilon_{\mathrm{Ti}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Ti}} + p_{\mathrm{TiO}} + p_{\mathrm{TiO_2}} + ... \tag{5.36}$$

Kondensation von ZrC: Für die Aktivität von ZrC gilt

$$a_{\mathrm{ZrC}} = p_{\mathrm{Zr}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{ZrC}) \ . \tag{5.37}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_{c} gilt

$$1 = p_{\mathrm{Zr}} p_{\mathrm{C}} K_p(\mathrm{ZrC}) \ . \tag{5.38}$$

Wenn der Bruchteil f_{ZrC} des Zirkons im ZrC gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{ZrC}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\left(\epsilon_{\mathrm{C}} - f_{\mathrm{TiC}}\epsilon_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{ZrC}}\epsilon_{\mathrm{Zr}} - f_{\mathrm{CV_2}}\epsilon_{\mathrm{V}} - f_{\mathrm{SiC}}\epsilon_{\mathrm{Si}}\right) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.39}$$

$$\left(1 - f_{\mathrm{ZrC}}\right)\epsilon_{\mathrm{Zr}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{Zr}} + p_{\mathrm{ZrO}} + p_{\mathrm{ZrC}} + ... \tag{5.40}$$

Kondensation von $\mathbf{CV_2}$: Für die Aktivität von CV_2 gilt

$$a_{\mathrm{CV_2}} = p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{V}}^2 K_p(\mathrm{CV_2}) \ . \tag{5.41}$$

Unterhalb der Kondensationstemperatur T_{c} gilt (s.Abb. 5.4 unten)

$$1 = p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{V}}^2 K_p(\mathrm{CV_2}) \ . \tag{5.42}$$

Wenn der Bruchteil $f_{\mathrm{CV_2}}$ des Vanadiums im CV_2 gebunden ist, dann verbleibt der Teil $(1 - f_{\mathrm{CV_2}})$ in der Gasphase. Für das chemische Gleichgewicht in der Gasphase gilt analog zu vorher

$$\left(\epsilon_{\mathrm{C}} - f_{\mathrm{TiC}}\epsilon_{\mathrm{Ti}} - f_{\mathrm{ZrC}}\epsilon_{\mathrm{Zr}} - f_{\mathrm{SiC}}\epsilon_{\mathrm{Si}} - f_{\mathrm{CV_2}}\epsilon_{\mathrm{V}}\right) P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{C}} + p_{\mathrm{CO}} + p_{\mathrm{HCN}} + ... \tag{5.43}$$

$$\left(1 - f_{\mathrm{CV_2}}\right)\epsilon_{\mathrm{V}} P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{V}} + p_{\mathrm{VO}} + p_{\mathrm{VO_2}} + ... \tag{5.44}$$

5.4 Stabilitätsgrenzen

Um die verschiedenen Staubsorten zu bestimmen, die in der zirkumstellaren Hülle eines S-Sterns beim Übergang M–S–C auftreten können, wurden die Kondensationstemperaturen für die wichtigsten Kondensate bei verschiedenen C/O-Verhältnissen im Bereich C/O= 0.7 bis C/O= 1.2 bei einem Druck von $P = 10^{-4}$ dyn cm^{-2} berechnet. Zu diesem Zweck wurde das System der Gleichungen (5.11) ... (5.44) zusammen mit der Gasphasenchemie gelöst und durch Newton-Raphson-Iteration diejenige Temperatur bestimmt, bei der für den interessierenden Stoff der Kondensationsgrad $f = 0$ wird. Die Ergebnisse sind für die wichtigsten Stoffe in den Abb. 5.5 und 5.6 dargestellt. Es läßt sich erkennen, daß bis C/O$\approx$ 0.8 die Chemie etwa der bei M-Sternen entspricht. Dies läßt sich mit einer einfachen Rechnung bestätigen:

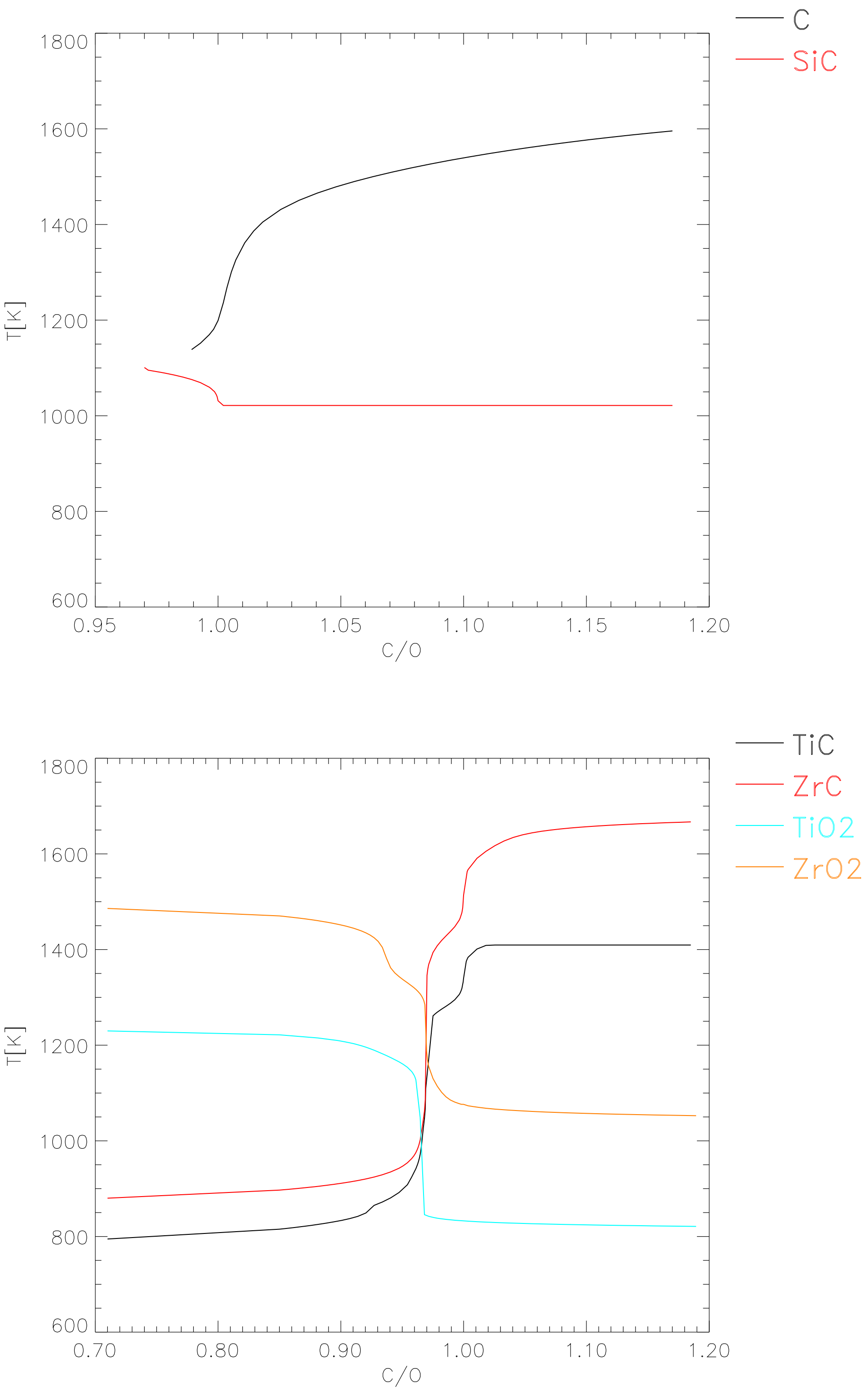


Abbildung 5.6 Stabilitätsgrenze der wichtigsten Kondensate, bei einem Druck von $P = 10^{-4}$dyn cm^{-2}.

In M-Sternen ist derjenige Teil des Sauerstoffs, der in Mineralien gebunden ist, im Forsterit (Mg_2SiO_4) und Korund (Al_2O_3) gebunden. Der Anteil, der in der Gasphase verbleibt, ist bei einer Sauerstoffhäufigkeit nach Tabelle 4.1 und Aluminium- und Siliziumhäufigkeiten gemäß Anhang A gegeben durch

$$\epsilon_{\mathrm{O}'} = \epsilon_{\mathrm{O}} - 1.5\epsilon_{\mathrm{Al}} - 4\epsilon_{\mathrm{Si}} = 5.3924 \cdot 10^{-4} \,. \tag{5.45}$$

Dieser Anteil des Sauerstoffs bildet zunächst CO und der verbleibende Rest des Sauerstoffs H_2O. Wenn die C-Häufigkeit beim Übergang M–S-Stern so groß geworden ist, daß kein Sauerstoff für die Bildung von H_2O übrigbleibt, dann kommt es zu einer wesentlichen Veränderung der Chemie. Dieser Punkt ist erreicht, wenn $\epsilon_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{O}'}$ gilt. Dann ist

$$\frac{\epsilon_{\mathrm{C}}}{\epsilon_{\mathrm{O}}} = 0.78 \,. \tag{5.46}$$

Wenn die Kohlenstoffhäufigkeit diese Grenze überschreitet, dann bindet das CO wegen der außergewöhnlich hohen Bindungsenergie einen Teil des Sauerstoffs, der sonst in den Mineralien gebunden ist. Das führt zu einer Abnahme der Kondensationstemperaturen von Forsterit und Korund, wie in Abb. 5.5 zu sehen ist.

Der Sauerstoff wird ab C/O$\approx$ 0.95 zu knapp, als daß überhaupt noch O-haltige Mineralien gebildet werden könnten. Dies bewirkt einen Sprung in der Chemie. Bis C/O$\approx$0.97 sind Korund und Forsterit die Hauptkondensate, danach kondensiert Aluminium in AlN und keine Silikate mehr. Nur in einem kleinen Bereich (zwischen C/O$\approx$0.95 – 0.97) kondensiert Eisen als erste Hauptkomponente. Für C/O$>$ 0.97 ist FeSi das Hauptkondensat.

Wie aus Abb. 5.6 (oben) ersichtlich, könnte ab C/O$\approx$1 im chemischen Gleichgewicht auch C kondensieren. Die spontane Rußbildung durch Kondensation aus der Gasphase erfolgt aber erst bei niedrigen Temperaturen, da polyaromatische Moleküle mit mehr als etwa 30 Kohlenstoffatomen, die sog. PAHs, [1] unter den Bedingungen einer zirkumstellaren Hülle nur im Temperaturbereich 900 K $\leq T \leq$ 1100 K wachsen können (Cherchneff al. [7]). Das Wachstum von Ruß scheint stattdessen nach den Ergebnissen von Laboruntersuchungen an zirkumstellaren Staubteilchen in Meteoriten auf Kondensationskeimen aus TiC und ZrC zu erfolgen (Bernatowicz et al. [4]). Diese Materialien können bereits bei hohen Temperaturen kondensieren, vor allen anderen Kondensaten aus Elementen mit wesentlich größerer Häufigkeit. Untersuchungen über die Struktur von Kohlenstoffstaubteilchen eindeutig zirkumstellaren Ursprungs in Meteoriten haben gezeigt (Bernatowicz et al. [4]), daß diese im Zentrum praktisch alle ein Korn von einigen nm Größe aus TiC oder ZrC enthalten, das offensichtlich als Kondensationskeim gedient hat. Diese kondensieren auch im Bereich der S-Sterne bei C/O $\geq$ 0.97 und können als Kondensationskeime dienen. Im Bereich C/O $\leq$ 0.97 kondensieren TiO_2 und ZrO_2 bei den höchsten Temperaturen. Es liegt dann nahe, daß diese im Bereich der MS- und S-Sterne die Kondensationskeime bilden.

[1] von engl. *PolyAromatic Hydrocarbons*

6. Windmodell mit Kondensation

In diesem letzten Kapitel wird unter Verwendung der möglichen Kondensate aus Kapitel 5 für S-Sterne in einem Windmodell das Staubwachstum in zirkumstellaren Hüllen berechnet. Bezüglich der verwendeten Ergebnisse aus Kapitel 5 ist anzumerken, daß bei deren Berechnung von einem chemischen Gleichgewicht ausgegangen wurde, welches hier nicht mehr vorliegt.

In diesem Kapitel werden ebenso Aspekte der Hydrodynamik wie des Strahlungstransportes berücksichtigt. Desweiteren liegt im Sternwind keine konstante Dichte mehr vor.

6.1 Verdampfung und Wachstum der Staubteilchen

Staubteilchen können durch Anlagerung von Teilchen aus der Gasphase wachsen oder durch Verdampfungsprozesse abgebaut werden. Der Mittelwert der senkrechten Geschwindigkeitskomponente der Gasteilchen relativ zur Oberfläche eines Staubteilchens ist

$$v_{\mathrm{th}} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}}\ . \tag{6.1}$$

m ist die Masse des Gasteilchens. Die Rate der Anlagerung von Teilchen pro Zeit- und Flächeneinheit ist

$$j^w = \alpha\ \cdot n \cdot v_{\mathrm{th}}\ . \tag{6.2}$$

α ist der Stickingkoeffizient, der die Wahrscheinlichkeit angibt, mit welcher es beim Stoß mit der Oberfläche zur Anlagerung kommt.

Staubteilchen verdampfen, wenn gelegentlich Teilchen von der Oberfläche in die Gasphase übergehen. Die Verdampfungsrate ist im thermodynamischen Gleichgewicht gleich der Wachstumsrate

$$j^w = j^v\ . \tag{6.3}$$

Damit gilt

$$\alpha\, n_g v_{\text{th}} = j^v \ . \tag{6.4}$$

n_g ist die Teilchendichte im Gas, das sich im thermodynamischen Gleichgewicht mit dem Festkörper befindet. Mit $p_v = n_g kT$ gilt

$$j^v = \alpha\, v_{\text{th}} \frac{p_v}{kT} \ . \tag{6.5}$$

p_v ist der Dampfdruck im thermodynamischen Gleichgewicht.

Für die Änderung durch Wachstums- und Verdampfungsprozesse der Anzahl N der Grundmoleküle, aus denen der Festkörper aufgebaut ist, gilt

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = A\big(j^w - j^v\big) \ . \tag{6.6}$$

A ist der Flächeninhalt der Teilchenoberfläche. Mit (6.2) und (6.5) ergibt sich für (6.6)

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = A\alpha\, n_g v_{\text{th}}\Big(1 - \frac{p_v}{p_g}\Big) \ . \tag{6.7}$$

p_g ist der Partialdruck der Gasphasenspezies.

Nimmt man an, daß die Teilchen kleine Kugeln mit dem Radius a sind, dann gilt

$$A = 4\pi a^2 \ . \tag{6.8}$$

Das Volumen, das eines der Grundmoleküle im Festkörper einnimmt, ist

$$V_0 = \frac{A_{\text{mol}} m_p}{\rho_K} \ . \tag{6.9}$$

ρ_K ist die Massendichte des kondensierten Festkörpers und A_{mol} ist das Molekulargewicht des Grundmoleküls, aus dem der Festkörper aufgebaut ist.

In einer Kugel mit Radius a befinden sich

$$N = \frac{4\pi}{3} a^3 V_0^{-1} \tag{6.10}$$

Moleküle. Daraus folgt

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \frac{4\pi a^2}{V_0}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = \frac{A}{V_0}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} \ , \tag{6.11}$$

sowie mit (6.7)

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0 \alpha\, n_g v_{\text{th}}\Big(1 - \frac{p_v}{p_g}\Big) \ . \tag{6.12}$$

Schließlich ergibt sich für die Wachstumsgleichung

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0 \alpha\, n_g v_{\text{th}}\Big(1 - \frac{1}{S}\Big)} \tag{6.13}$$

mit

$$S = \frac{p_g}{p_v(T)} \; . \tag{6.14}$$

S ist das Übersättigungsverhältnis, es ist das Verhältnis von Partialdruck der Wachstumsspezies in der Gasphase zum Dampfdruck. Der Faktor $(1-\frac{1}{S})$ beschreibt die Reduktion der Wachstumsrate durch Verdampfung von der Oberfläche. Ein Teilchen wächst, wenn $S > 1$ ist.

Für den Anteil f_s des kondensierbaren Materials, der in die Staubsorte eingebaut ist, gilt

$$f_s \epsilon_i N_{\mathrm{H}} V_0 = \epsilon_s N_{\mathrm{H}} V \; , \tag{6.15}$$

wobei N_{H} die Dichte der Wasserstoffkerne ist. ϵ_i ist die Häufigkeit der Atome des Schlüsselelelements, die im Staub gebunden werden können. ϵ_s ist die Häufigkeit der vorhandenen Staubteilchen pro Wasserstoffkern und V ist das Volumen der einzelnen Staubteilchen.

Bei kugelförmigen Staubteilchen mit dem Radius a gilt $V = \frac{4\pi}{3}(a^3 - a_0^3)$. Damit folgt für f_s

$$\boxed{f_s = \frac{4\pi}{3}\left(a^3 - a_0^3\right)\frac{\epsilon_s}{V_0 \epsilon_i} \; ,} \tag{6.16}$$

wobei a_0 der Radius des Kondensationskeims ist.

Mit $f(t)$ kann ermittelt werden, welcher Teil der im Staub gebundenen Elemente der Gasphase entzogen wurde, und mit den entsprechend reduzierten Gasphasenhäufigkeiten können die Molekülhäufigkeiten berechnet werden (für diese wird chemisches Gleichgewicht angenommen). Hierdurch wird die Dichte n_g der Wachstumspezies in (6.13) festgelegt.

Es wird angenommen, daß die Staubteilchen der wesentlichen Staubkomponenten, welche die beobachtbare zirkumstellare Staubhülle hervorrufen, alle auf Kondensationskeime mit einem einheitlichen Radius a_0 aufwachsen. Die Zahl dieser Kondensationskeime ϵ_s pro H-Kern sei konstant. Da in dieser Arbeit keine Nukleation berechnet wird, werden folgende Annahmen für die Wachstumskeime gemacht:

Anfangsradien: $1 \cdot 10^{-7}$ cm.

Anzahl der Wachstumskeime pro H-Kern: $1 \cdot 10^{-13}$.

Da $\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}$ nach (6.13) von a unabhängig ist, wachsen die Staubteilchen nach Überschreiten der Stabilitätsgrenze ($S = 1$) alle in gleicher Weise an. Sie haben dann einheitliche Radien $a(t)$. Mit bekanntem $a(t)$ kann aus (6.16) zu jedem Zeitpunkt der Kondensationsgrad $f(t)$ berechnet werden.

Tabelle 6.1 Staubsorten, die bei der Modellrechnung berücksichtigt sind, und Elementhäufigkeiten ϵ_s, auf die sich der Kondensationsgrad f bezieht.

Staubsorten		ϵ_s
$MgFeSiO_4$	Olivin	ϵ_{Si}
Fe	Eisen	ϵ_{Fe}
FeSi		ϵ_{Si}
MgO	Periklas	ϵ_{Mg}
SiC	Siliziumkarbid	ϵ_{Si}
C	Ruß	ϵ_{C}

6.1.1 Die Staubsorten

Die Tabelle 6.1 zeigt die im Modell berücksichtigten Staubsorten. Im Folgenden werden die Bildungsreaktionen und die Staubwachstumsgleichungen für jede dieser Staubsorten dargestellt.

Kondensation von Eisen: Eisen ist als freies Atom in der Gasphase vorhanden. Fe-Staub bildet sich durch die homogene Kondensationsreaktion

$$\mathrm{Fe} \longrightarrow \mathrm{Fe(s)}\ . \tag{6.17}$$

Für das Staubwachstum gilt

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{Fe}}}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{Fe}}\big(j^w_{\mathrm{Fe}} - j^v_{\mathrm{Fe}}\big) \tag{6.18}$$

mit

$$j^w_{\mathrm{Fe}} = \alpha_{\mathrm{Fe}} v_{\mathrm{th}}\, n_{\mathrm{Fe}} \tag{6.19}$$

und

$$j^v_{\mathrm{Fe}} = \alpha_{\mathrm{Fe}}\, v_{\mathrm{th}} \frac{p_{v,\mathrm{Fe}}}{kT}\ . \tag{6.20}$$

Der Verdampfungskoeffizient α_{Fe} (Tab. 6.2) ist experimentell gemessen.

Kondensation von FeSi: Si ist bei S-Sternen in der Gasphase als freies Atom und gebunden im SiS-Molekül vorhanden. Die Bildung von FeSi-Kondensat kann durch die folgenden Reaktionen

$$\mathrm{Fe} + \mathrm{Si} \longrightarrow \mathrm{FeSi(s)} \quad \Delta H : -944\,\mathrm{kJ\,Mol^{-1}} \tag{6.21}$$

und

$$\mathrm{Fe} + \mathrm{SiS} \longrightarrow \mathrm{FeSi(s)} + \mathrm{S} \quad \Delta H : -323\,\mathrm{kJ\,Mol^{-1}} \tag{6.22}$$

erfolgen. Diese Reaktionen sind beide exotherm und daher möglich. Für das Staubwachstum gilt

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{FeSi}}}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{FeSi}}\big(j^w_{\mathrm{FeSi}} - j^v_{\mathrm{FeSi}}\big) \tag{6.23}$$

mit

$$j^w_{\mathrm{FeSi}} = \alpha_{\mathrm{FeSi}} v_{\mathrm{th,Si}}\, n_{\mathrm{Si}} + \alpha_{\mathrm{SiS}} v_{\mathrm{th,SiS}}\, n_{\mathrm{SiS}} \tag{6.24}$$

und

$$j^v_{\mathrm{FeSi}} = \alpha_{\mathrm{FeSi}}\, v_{\mathrm{th,Si}} \frac{p_{v,\mathrm{Si}}}{kT} \;. \tag{6.25}$$

Der Verdampfungskoeffizient α_{FeSi} (Tab. 6.2) ist in Analogie zu Verdampfungskoeffizienten von Metallen geschätzt. Der Verdampfungskoeffizient α_{SiS} ist auf Null gesetzt.

Kondensation von Olivin: Die Kondensation von Olivin aus der Gasphase erfordert neben einem SiO-Molekül drei weitere Sauerstoffatome, um den SiO_4-Tetraeder zu komplettieren. Mg und Fe sind in der Gasphase als freie Atome vorhanden. Eine mögliche Reaktion für die Bildung von Forsterit ist

$$2\mathrm{Mg} + \mathrm{SiO} + 3\mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{Mg_2SiO_4(s)} + 3\mathrm{H_2} \;. \tag{6.26}$$

Bei normaler Elementhäufigkeit in M-Sternen sind in der Gasphase wesentlich mehr H_2O als SiO-Moleküle vorhanden. Man kann dann annehmen, daß die Anlagerung des SiO-Moleküls der ratenbestimmende Schritt für das Silikatwachstum ist (Nagahra & Ozawa [31]). Wenn die Kohlenstoffhäufigkeit über die Häufigkeit $\epsilon_{\mathrm{O}'}$ (5.46) des in der Gasphase verbleibenden Sauerstoffs beim Übergang von M- zu S-Sternen ansteigt, dann stehen in der Gasphase weniger als vier H_2O-Moleküle pro SiO-Molekül zur Verfügung. In diesem Fall muß man annehmen, daß die Anlagerung von H_2O zum Aufbau des SiO_4-Tetraeders der ratenbestimmende Reaktionsschritt ist. Daher liegt folgender Ansatz nahe:

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{ol}}}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{ol}} \big(\min(j^w_{\mathrm{ol,SiO}}\,,\, j^w_{\mathrm{ol,H_2O}}) - j^v_{\mathrm{ol}} \big) \tag{6.27}$$

mit

$$j^w_{\mathrm{ol,SiO}} = \alpha_{\mathrm{SiO}} v_{\mathrm{th,SiO}}\, n_{\mathrm{SiO}} \tag{6.28}$$

$$j^w_{\mathrm{ol,H_2O}} = \alpha_{\mathrm{H_2O}} v_{\mathrm{th,H_2O}}\, n_{\mathrm{H_2O}} \;, \tag{6.29}$$

und

$$j^v_{\mathrm{ol}} = \alpha_{\mathrm{SiO}}\, v_{\mathrm{th,SiO}} \frac{p_{v,\mathrm{SiO}}}{kT} \;. \tag{6.30}$$

Der Verdampfungskoeffizient α_{SiO} (Tab. 6.2) ist experimentell bestimmt.

Kondensation von Siliziumcarbid: SiC bildet sich in folgender Reaktion

$$\mathrm{Si_2C} \longrightarrow \mathrm{SiC(s)} + \mathrm{Si} \tag{6.31}$$

Für das Staubwachstum gilt

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{SiC}}}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{SiC}} \big(j^w_{\mathrm{SiC}} - j^v_{\mathrm{SiC}} \big) \tag{6.32}$$

mit

$$j^w_{\mathrm{SiC}} = \alpha_{\mathrm{SiC}} v_{\mathrm{th,Si_2C}}\, n_{\mathrm{Si_2C}} \tag{6.33}$$

und

$$j^v_{\mathrm{SiC}} = \alpha_{\mathrm{SiC}}\, v_{\mathrm{th,Si}} \frac{p_{v,\mathrm{Si}}}{kT}\ . \tag{6.34}$$

Der Verdampfungskoeffizient α_{SiC} (Tab. 6.2) ist geschätzt.

Kondensation von Periklas: Die Bildung von Periklas erfolgt durch

$$\mathrm{Mg} + \mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{MgO(s)} + \mathrm{H_2}\ . \tag{6.35}$$

Für das Staubwachstum gilt

$$\frac{\mathrm{d}a_{\mathrm{MgO}}}{\mathrm{d}t} = V_{0,\mathrm{MgO}}\big(j^w_{\mathrm{MgO}} - j^v_{\mathrm{MgO}}\big)\ . \tag{6.36}$$

mit

$$j^w_{\mathrm{MgO}} = \alpha_{\mathrm{MgO}} v_{\mathrm{th,Mg}}\, n_{\mathrm{Mg}} \tag{6.37}$$

und

$$j^v_{\mathrm{MgO}} = \alpha_{\mathrm{MgO}}\, v_{\mathrm{th,Mg}} \frac{p_{v,\mathrm{Mg}}}{kT}\ . \tag{6.38}$$

Der Verdampfungskoeffizient α_{MgO} (Tab. 6.2) ist experimentell gemessen.

Die zur Berechnung des Staubwachstums notwendigen physikalischen Daten sind in Tabelle 6.2 dargestellt.

6.2 Das Staubhüllenmodell

Annahme über den Aufbau der zirkumstellaren Staubhülle:

1. Es wird eine sphärisch symmetrische Staubhülle um einen isolierten Einzelstern vorausgesetzt.
2. Der zentrale Stern habe den Radius R_*, die Effektivtemperatur T_{eff} und die Leuchtkraft L_*.
3. Der Stern ist von einer äußeren Staubhülle umgeben, die bei einem bestimmten inneren Radius (R_i) beginnt und deren äußerer Radius bei $R_a = 10^{17}$cm liegt. Der innere Bereich zwischen der Photosphäre des Sterns (bei R_*) und der Innenkante der Staubhülle (bei R_i) wird als leer angenommen.
4. Aus dem Stern strömt ein Sternwind mit einer gegebenen Massenverlustrate $\dot{M}$ aus. In dem sich abkühlenden Gas kondensiert Staub aus der Gasphase aus. Die Kondensation startet bei Unterschreiten der Stabilitätsgrenze der jeweiligen Staubsorten.
5. Der zentrale Stern ist kein Veränderlicher. Tatsächlich sind fast alle Sterne auf dem AGB mit zirkumstellaren Staubhüllen Veränderliche, und zwar entweder ein Mira-Veränderlicher oder ein halbregelmäßiger oder irregulärer Langperiodischer Veränderlicher. Die Modellierung mit einem Veränderlichen wäre aber zu kompliziert (Bowen [6] und Fleischer et al. [11]).

Tabelle 6.2 Atomgewichte, Dichten, Verdampfungskoeffizienten und Quellen für die verschiedenen Staubsorten .

Staubsorten	A	ρ	α	Quelle
$MgFeSiO_4$	172.2	3.3	0.1	Hashimoto [18]
Fe	55.847	7.86	1.0	Schäfer [36]
FeSi	83.931	6.1	0.5	Geschätzt
MgO	40.304	3.6	0.2	Hashimoto [18]
SiC	40.097	2.2	0.5	Geschätzt
C	12.001	3.16	0.37	Schäfer [36]

6.3 Das Gleichungssystem

Im Folgenden werden die Gleichungen, die den Massenausstrom eines späten S-Sterns beschreiben, in dessen Wind Staub auskondensiert, zusammengestellt.

Die Grundgleichungen sind im einzelnen:

- *Impulsgleichung* :

$$v\,\frac{\partial v}{\partial r} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial r} - \frac{GM_*}{r^2}(1-\Gamma) \tag{6.39}$$

mit

$$\Gamma = \frac{L_*}{L_{\mathrm{Edd}}}\ . \tag{6.40}$$

- *Kontinuitätsgleichung* :

$$\dot{M} = 4\pi r^2 \rho\, v\ . \tag{6.41}$$

- *Temperaturgleichung* :

$$T^4(r) = \frac{1}{2}T_*^4\left[1-\mu_*(r)+\frac{3}{2}\tau_L(r)\right]\frac{\kappa_J^{abs}}{\kappa_B^{abs}}\ . \tag{6.42}$$

- *Gleichung für die optische Tiefe* :

$$\frac{\mathrm{d}\tau_L}{\mathrm{d}r} = -\rho\,\kappa_{\mathrm{H}}\frac{R_*^2}{r^2}\ . \tag{6.43}$$

- *Gleichungen für das Staubwachstum* :

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = V_0\alpha\, n_g v_{\mathrm{th}}\left(1-\frac{p_v}{p_g}\right)\ . \tag{6.44}$$

- *Gleichungen für den Kondensationsgrad* :

$$f_s = \frac{4\pi}{3}\left(a^3-a_0^3\right)\frac{\epsilon_s}{V_0\epsilon_i}\ . \tag{6.45}$$

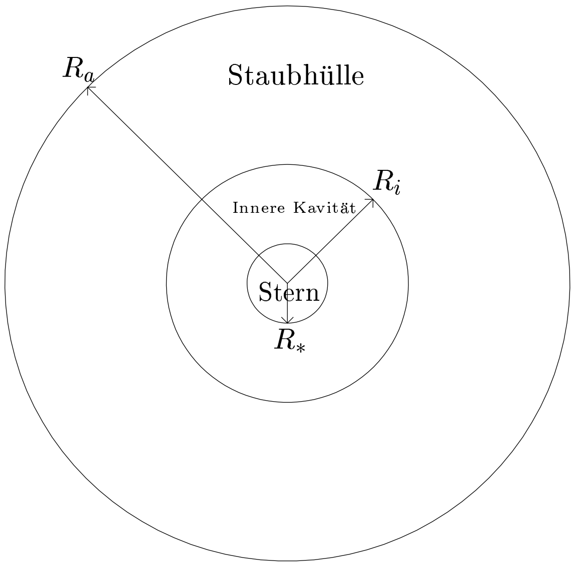


Abbildung 6.1 Aufbau der Staubhülle.

Dazu kommen noch die Gleichungen für die Gaschemie (Kap. 4) und die Extinktionskoeffizienten (Kap. 3).

Dies ist ein System von $2 + N$ Differentialgleichungen erster Ordnung, wenn N Staubsorten berücksichtigt werden, das mit $2 + N + K$ (K: Anzahl der Elemente) algebraischen Gleichungen gekoppelt ist. Die Gleichungen werden ab dem Punkt R_i bis zum Außenrand R_a in einem mit der ausströmenden Materie mitbewegten System (Lagrange System) gelöst. R_i ist der Punkt, an dem die Staubsorte mit der höchsten Kondensationstemperatur zu kondensieren beginnt.

Die Anfangsbedingungen sind in Kap. 3 beschrieben.

6.4 Numerisches Lösungsverfahren

Die Lösung der Differentialgleichungen erfolgt durch das Adams-Bashforth- Stepper-Verfahren [14], [42]. Dieses Verfahren erreicht eine Genauigkeitsordnung $O(h^2)$ mit nur *einer* Berechnung der rechten Seiten der Differentialgleichungen. Die Schrittweitensteuerung erfolgt über die Bedingung, daß sich die relevanten Variablen pro Einzelschritt um $\approx 1\%$ ändern. Testrechnungen mit einigen Differentialgleichungen mit bekannten Lösungen haben gezeigt (Gail, private Mitteilung), daß sich mit dieser einfachen Strategie eine Integrationsgenauigkeit von der Größenordnung 10^{-3} erreichen läßt. Wegen der sonstigen Unsicherheiten des Modells ist diese Genauigkeit vollkommen ausreichend. Zum Start eines solchen Mehrschrittverfahrens ist es natürlich erforderlich, daß man über Startwerte verfügt, die man sich auf andere Weise beschaffen muß. Hierzu wird das Vorwärts-Eulerverfahren verwendet. Ein solch vergleichsweise einfaches Verfahren kann man nur dann verwenden, wenn das System nicht steif ist, welche Voraussetzung hier erfüllt ist.

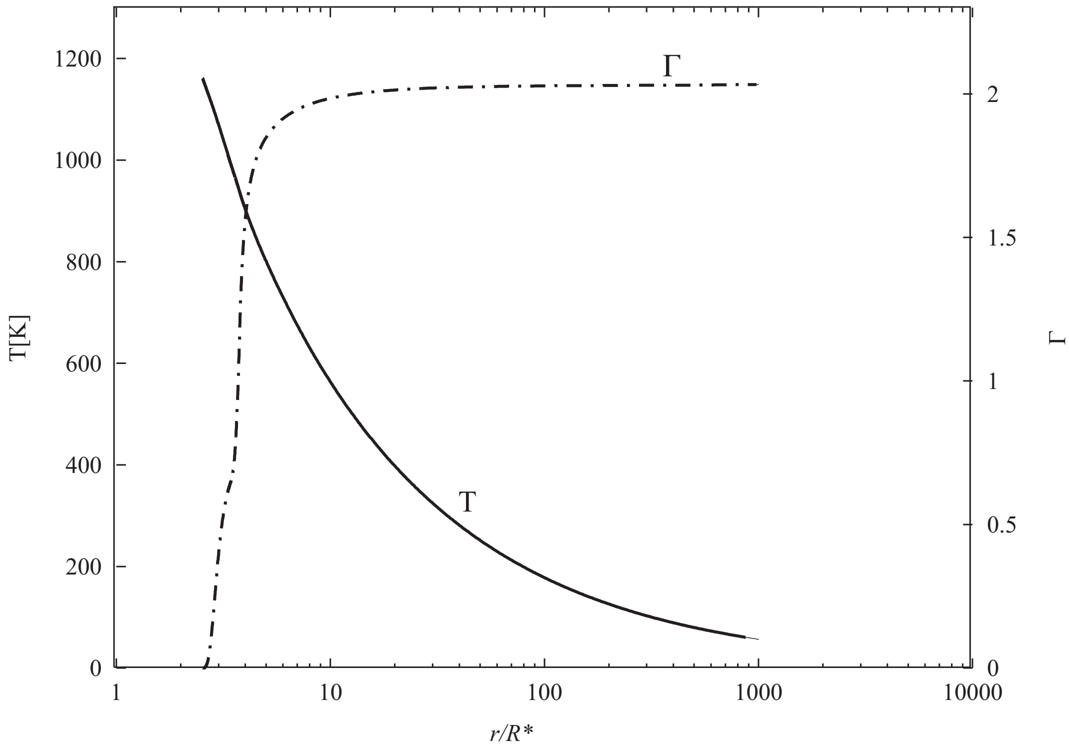


Abbildung 6.2 Verlauf der Temperatur (durchgezogene Linie) und das Verhältnis Γ von Strahlungs- zu Schwerebeschleunigung (gepunktete Linie). S-Stern.

6.5 Das Windmodell

Als Zentralstern wird ein S-Stern angenommen. Die in der Modellrechnung verwendeten Häufigkeiten sind in Tabelle 4.1 angegeben. Der Stern wird durch die folgenden Parameter beschrieben:

Leuchtkraft L_*: $2 \cdot 10^4 \mathrm{L}_\odot$

Effektive Temperatur T_* : 2500 K

Für den Sternwind werden folgende Annahmen gemacht:

Massenverlustrate $\dot{M}$: $1 \cdot 10^{-5} \mathrm{M}_\odot/a$

Anfangsgeschwindigkeit vor der Kondensation v_a: 1km/s

Mit diesen Parametern werden Modelle für den Sternwind, einschließlich Staubkondensation, berechnet. Wir diskutieren zunächst ein Windmodell für S-Sterne, danach wird für eine Schar von Modellen mit variablen C/O-Verhältnissen die Staubkondensation beim M-S-C-Übergang untersucht.

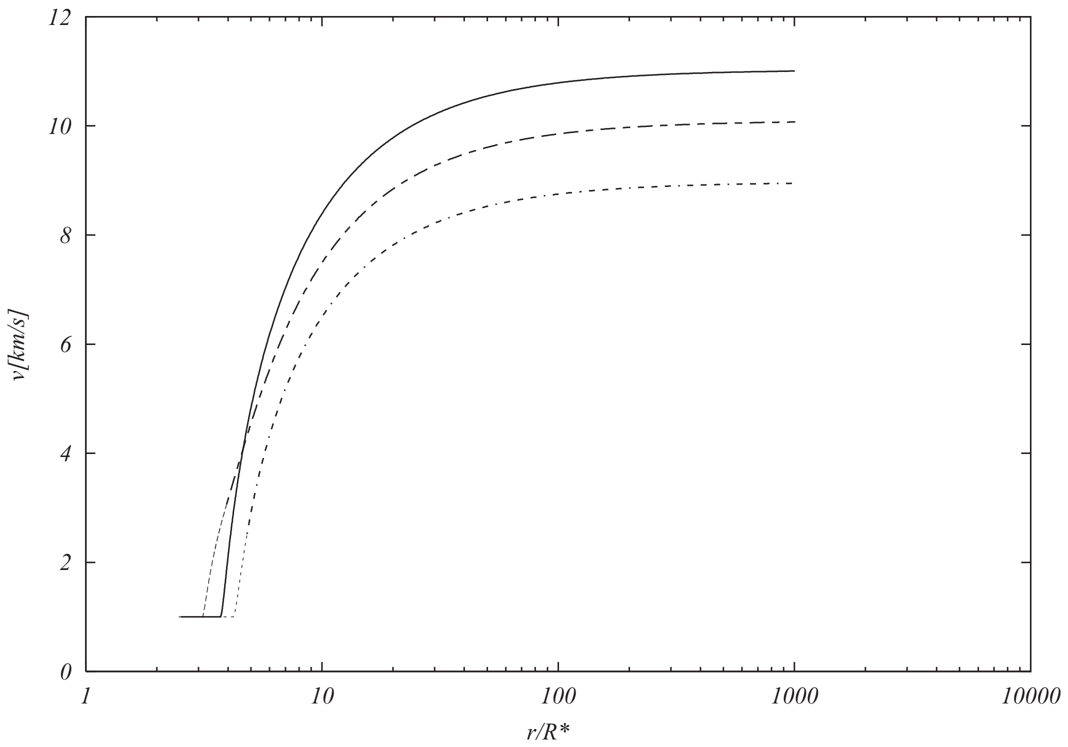


Abbildung 6.3 Expansionsgeschwindigkeit der Hülle für $\dot{M} = 1 \cdot 10^{-5} M_{\odot}/a$ (durchgezogene Linie), $\dot{M} = 3 \cdot 10^{-5} M_{\odot}/a$ (gestrichelte Linie) und $\dot{M} = 5 \cdot 10^{-6} M_{\odot}/a$ (gepunktete Linie). S-Stern.

6.5.1 Windmodell für S-Sterne

Abb. 6.2 zeigt den Temperaturverlauf $T(r)$ in dem Gas und den Verlauf von $\Gamma(r)$. Die Kondensation von Staub wird unterhalb von T =1000 K möglich, die Temperatur nimmt dann mit zunehmendem Radius monoton ab. Γ wird im staubfreien Bereich durch die Gasopazität bestimmt. Diese ist viel kleiner als die Staubopazität, so daß Γ innerhalb von R_i sehr klein ist. Sobald Staub auskondensiert, wird Γ größer als eins und das Staub-Gas Gemisch wird auf hohe Überschallgeschwindigkeit beschleunigt.

Beobachtungen liefern für S-Sterne Expansionsgeschwindigkeiten im Bereich zwischen 5 und 15 kms^{-1} (Loup et al.[25]). Abb. 6.3 zeigt die Expansionsgeschwindigkeiten für verschiedene Massenverlustraten. Man sieht, daß die berechneten Geschwindigkeiten mit den beobachteten übereinstimmen. Was die Massenverlustrate betrifft, verhält sich die Geschwindigkeit erwartungsgemäß, d.h. für eine geringe Massenverlustrate ist sie ebenfalls gering.

Abb. 6.4 zeigt die radiale Variation der Kondensationsgrade f der verschiedenen Staubsorten für verschiedene Massenverlustraten $\dot{M}$ im Sternwind. In allen Modellen sind FeSi und SiC die ersten Kondensate, die bei der höchsten Temperatur auftreten. Metallisches Eisen kondensiert erst bei etwas niedrigerer Temperatur. Nur diese drei Kondensate werden mit erheblicher Häufigkeit gebildet. Erwartungsgemäß nimmt der Kondensationsgrad der Staubsorten, die als erste kondensieren, bei Zunahme der Massenverlustrate zu. Im Modell mit der höchsten Massenverlustrate, Abb. 6.4 (oben rechts), kondensieren FeSi und SiC bei hohen Temperaturen, aber Fe wächst

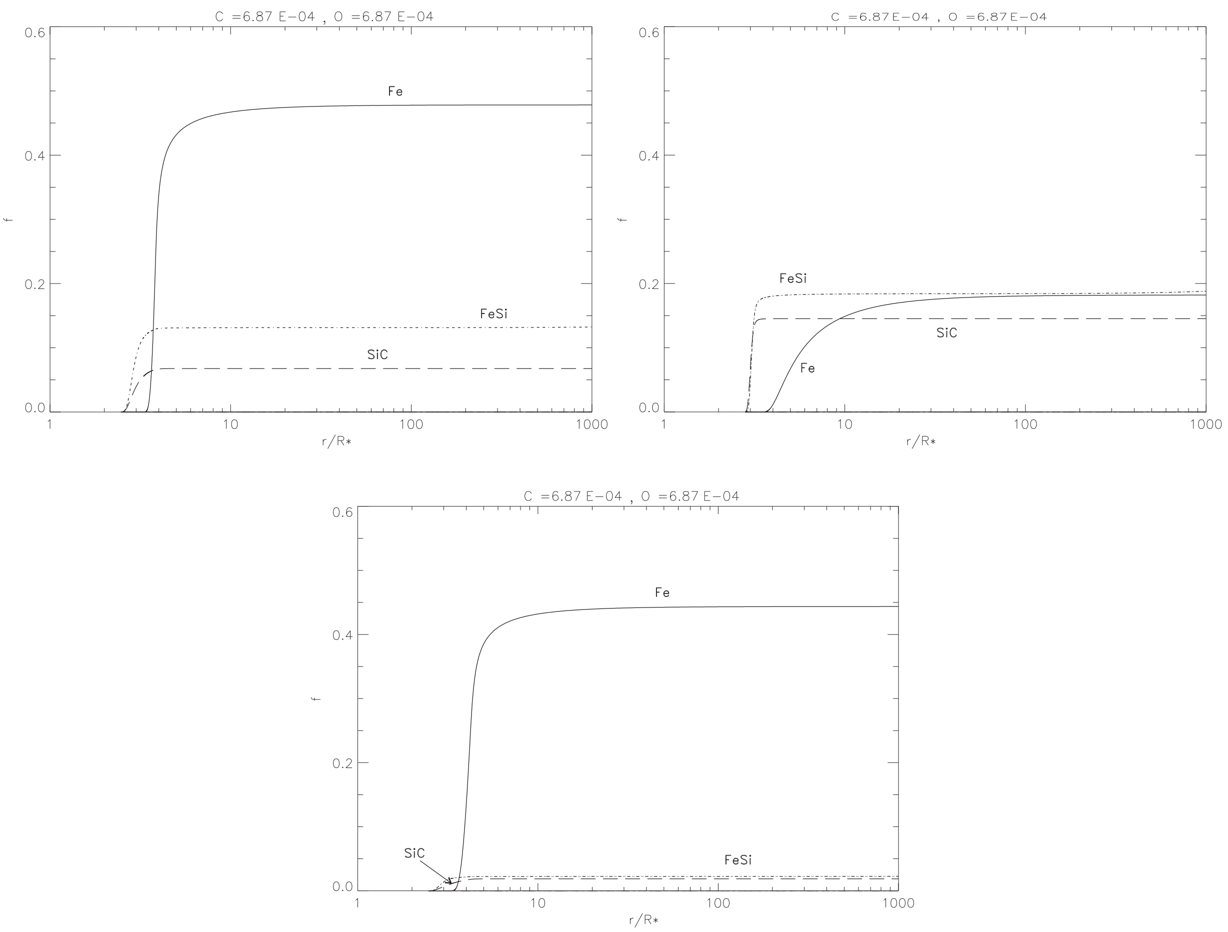


Abbildung 6.4 Kondensationsgrad für $\dot{M} = 1 \cdot 10^{-5} M_\odot/a$ (oben links), für $\dot{M} = 3 \cdot 10^{-5} M_\odot/a$ (oben rechts) und für $\dot{M} = 5 \cdot 10^{-6} M_\odot/a$ (unten). S-Stern.

in diesem Fall nur schlecht, so daß die Geschwindigkeit nicht so hohe Werte wie bei den Modellen mit kleinerer Massenverlustrate erreicht. Der Grund für den geringen Kondensationsgrad von Fe bei der hohen Massenverlustrate ist folgender:

- Der Strahlungsdruck auf FeSi und SiC treibt die Geschwindigkeit bereits vor Beginn der Fe-Kondensation auf so hohe Werte an, daß die Verdünnung des Gases eine effektive Kondensation von Fe verhindert.

Abb. 6.5 zeigt die Radien der verschiedenen Staubsorten. Diese sind kleiner als die üblicherweise angenommenen Staubradien von 0.1μm für Silikat- oder Kohlenstoffstaub in zirkumstellaren Hüllen, weil Fe und FeSi eine wesentlich höhere spezifische Dichte haben. Die dominierenden Staubsorten sind Fe und FeSi. SiC bildet sich zwar auch, aber in geringerem Maße. Andere Staubsorten sind vernachlässigbar.

Zum Vergleich wurde auch ein Modell mit den Elementhäufigkeiten eines M-Sterns berechnet. Die Kondensationsgrade von Staub für dieses Modell sind in Abb. 6.6 dargestellt. Hier ist zu sehen, daß die Hauptkondensate Olivin und Fe sind. Das ist das übliche Ergebnis, wie es für M-Sterne zu erwarten ist.

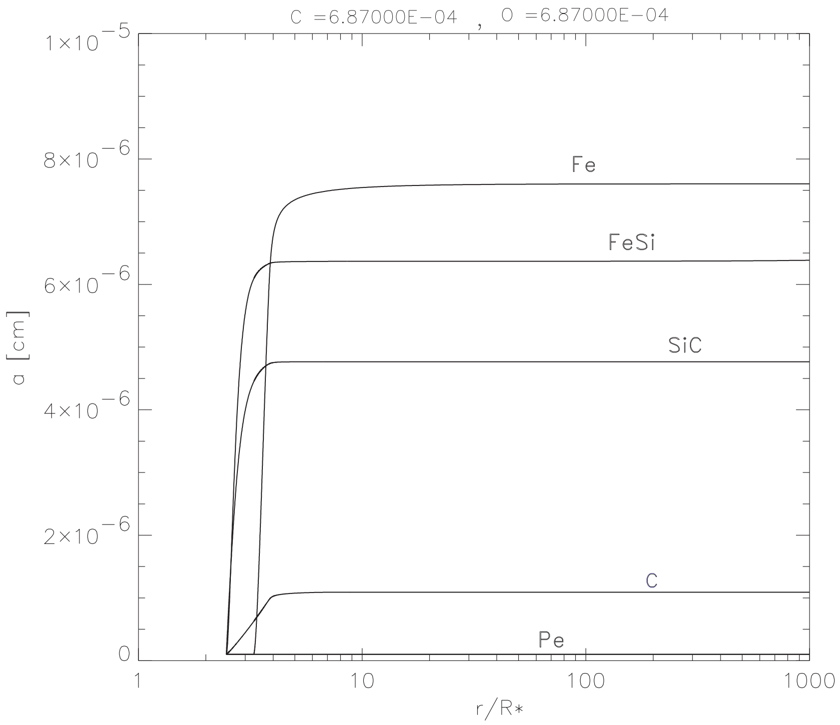


Abbildung 6.5 Staubteilchenradien für die verschiedenen Staubsorten. S-Stern.

6.5.2 Modelle für den M-S-C-Übergang

Im Folgenden werden Modelle für den Übergang von M- über S- zu C-Sternen untersucht. Abb. 6.7 und 6.8 zeigen die radiale Variation der Kondensationsgrade bei verschiedenen C/O-Verhältnissen.

Bei normalen M-Sternen ($C/O < 1$) sind Forsterit und metallisches Eisen die beiden Hauptkomponenten des Staubs. Mit zunehmendem C/O-Verhältnis ändern sich die Kondensationsgrade von Forsterit und Eisen in sehr unterschiedlicher Weise.

Der Kondensationsgrad von Forsterit nimmt ab, wenn die C-Häufigkeit anwächst und entsprechend die Häufigkeit O-haltiger Moleküle in der Gasphase abnimmt. Die Bildung von Forsterit endet bei einem C/O-Verhältnis von ≈ 0.9, da dann wegen der geringen Teilchendichten von SiO und H_2O das Wachstum ineffizient wird.

Die Eisenkondensation wird nicht direkt durch das C/O-Verhältnis beeinflußt. Deswegen ändert sich zunächst der Kondensationsgrad des Eisens mit zunehmendem C/O nur wenig. Die geringe Zunahme kann darauf zurückgeführt werden, daß durch den abnehmenden Kondensationsgrad von Forsterit der Strahlungsdruck und die Windgeschwindigkeit etwas abnehmen. Dadurch nimmt die Dichte nach außen etwas weniger rasch ab, was das Wachstum der Eisenteilchen begünstigt.

Wenn mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt das Silizium in der Gasphase nicht mehr vollständig im SiO und SiS gebunden werden kann, dann existieren in der Gasphase auch freie Si-Atome. Dann kann außer metallischem Eisen auch festes FeSi kondensieren. Dieses wird bei $C/O \geq 0.95$ neben dem Eisen als zweite Hauptkomponente

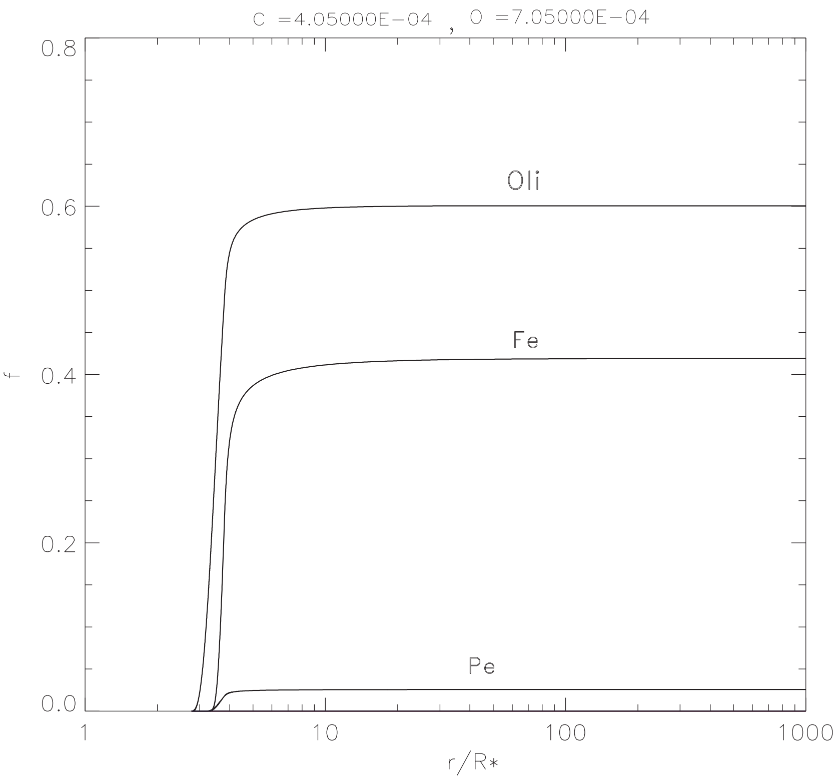


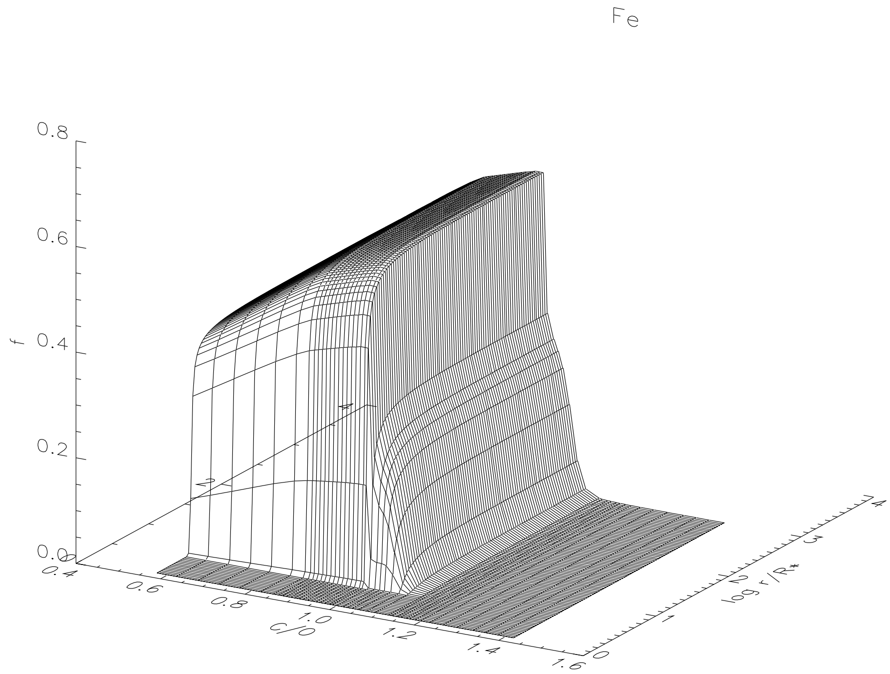
Abbildung 6.6 Kondensationsgrad im M-Stern ($\dot{M} = 1 \cdot 10^{-5} M_\odot/a$).

des Staubs gebildet. Damit verbunden ist eine Abnahme des Kondensationsgrads von Eisen.

Als dritte Staubkomponente wird, ebenfalls ab C/O $\approx$ 0.95, festes SiC gebildet. FeSi und SiC kondensieren beide bei etwa gleicher Temperatur, festes Fe beginn erst bei einer niedrigeren Temperatur zu kondensieren. Wegen der höheren Kondensationstemperatur von FeSi und SiC hat bei einer merklichen Häufigkeit von FeSi und SiC die Windgeschwindigkeit durch den Strahlungsdruck auf diese beiden Staubkomponenten schon erheblich zugenommen, so daß die Wachstumsbedingungen für Fe durch die starke Abnahme der Gasdichte ungünstig werden. Dadurch endet eine merkliche Kondensation von Fe bei etwa C/O= 1.02.

Bei C/O > 1 beginnt dann auch Kohlenstoffstaub zu kondensieren. Dies wurde in der Modellierung nicht berücksichtigt. Insgesamt ergibt sich für die Staubbildung bei der Änderung des C/O-Verhältnisses folgendes Bild:

- Bis C/O $\approx$ 0.8 hat man die übliche Staubmischung wie bei M-Sternen: Silikat und Eisen.
- Im Bereich 0.8 $\lesssim$ C/O $\lesssim$ 0.95 dominiert metallisches Eisen als Staubkomponente. Forsterit kommt nur noch in Spuren vor.
- Im Bereich 0.95 $\lesssim$ C/O $\lesssim$ 1.0 kondensieren Fe, FeSi und SiC. Der Anteil von Fe geht zwischen C/O $\approx$ 0.95 und C/O $\approx$ 1 rasch gegen Null.
- Im Bereich C/O $\gtrsim$ 1 kondensieren FeSi und SiC. Bei diesen Häufigkeiten wird dann auch Ruß gebildet.



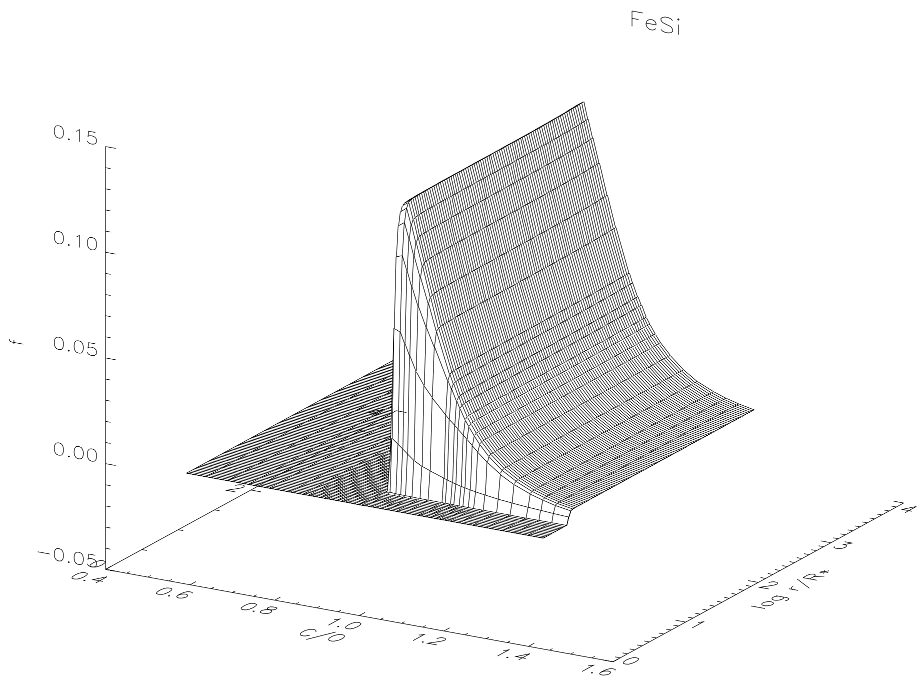
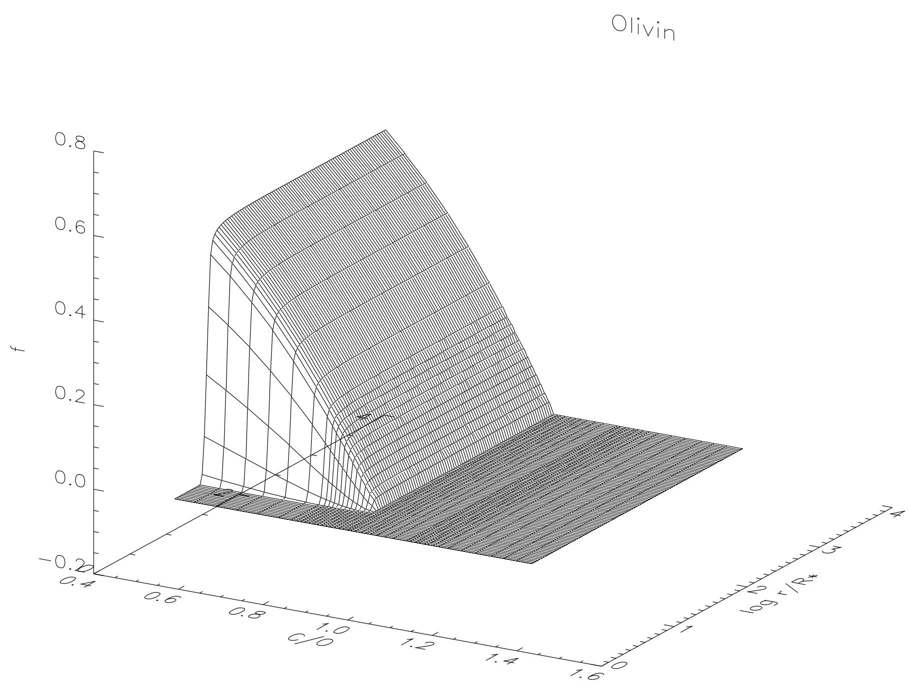


Abbildung 6.7 Kondensationsgrad in Abhängigkeit von C/O-Verhältnis und Radius für Eisen (oben) und FeSi (unten).



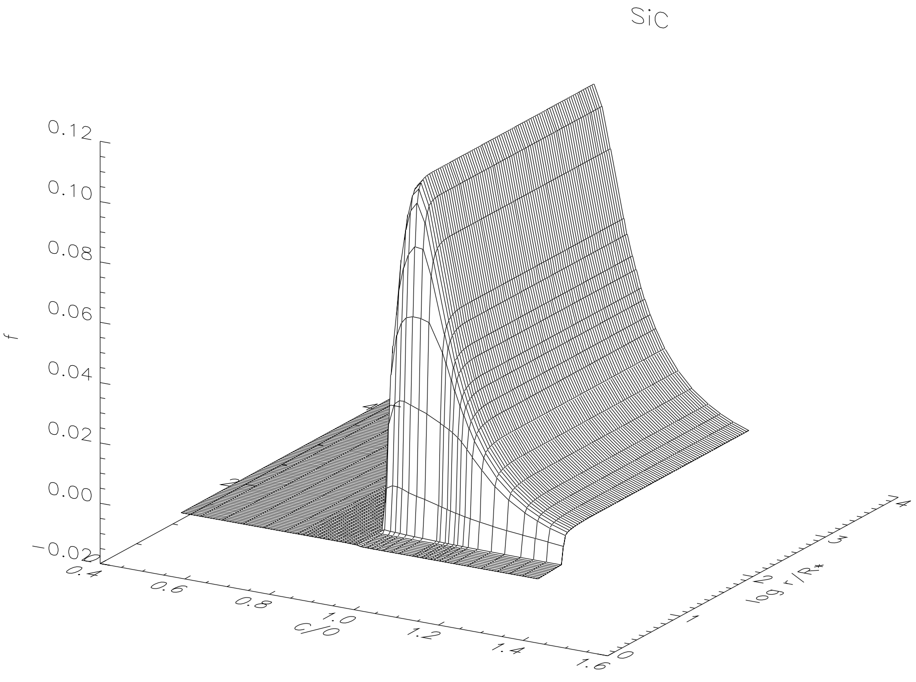


Abbildung 6.8 Kondensationsgrad in Abhängigkeit von C/O-Verhältnis und Radius für Olivin (oben) und SiC (unten).

6.5.3 Synthetische Spektren

Mit diesen Modellen wurden Spektren mit einem gegebenen Programm zur Lösung des Strahlungstransportproblems in einer zirkumstellaren Staubhülle berechnet. Die Sternparameter sind in 6.5 angegeben. Für die einzelnen Staubsorten wurden folgende optischen Konstanten verwendet:

Olivin: Dorschner et al. [9]

Eisen: Lide [22]

SiC: Pegourie [32]

Für FeSi wurden mangels verfügbarer optischer Daten die von Eisen verwendet.

Abb. 6.9 (oben) zeigt ein berechnetes M-Stern-Spektrum. Hier sind die charakteristischen Silikatbanden bei $\approx 9.7\ \mu$m und 18μm zu erkennen. In dem Spektrum des S-Sterns ist nur die SiC-Bande zu erkennen. Spektren von C-Sternen und S-Sternen sind nicht voneinander zu unterscheiden, da der wesentliche Absorber in beiden Fällen keine charakteristischen Absorptionsbanden hat. Für C-Sterne ist der Hauptabsorber Kohlenstoff, für S-Sterne hingegen Eisen. Kohlenstoff und Eisen ergeben beide sehr ähnliche Infrarotspektren, da beide nahezu graue Absorber sind. Bei einer Klassifikation des Sterns nur aufgrund des IR-Spektrums, würden Sterne im Bereich $C/O \approx 1$ als C-Stern eingestuft werden. Dies wurde auch in einigen Fällen beobachtet (Skinner et al [34]).

Eine genaue Berechnung der Spektren für reale Sterne erfordert eine genaue Kenntnis der zeitlichen Entwicklung des Übergangs von M- zu C-Sternen, da diese festlegt, wie die verschiedenen Staubkomponenten in der Hülle verteilt sind.

Hierzu wäre eine Modellierung der zeitlichen Entwicklung des Sternwinds erforderlich, was jedoch über den Rahmen der Arbeit hinausginge.

In Anhang C werden weitere Spektren für alle Modelle aus 6.5.2 gezeigt. Anhand dieser Spektren ist das Verschwinden der Silikatbanden und das Auftauchen der SiC-Banden mit zunehmendem C/O-Verhältnis zu sehen.

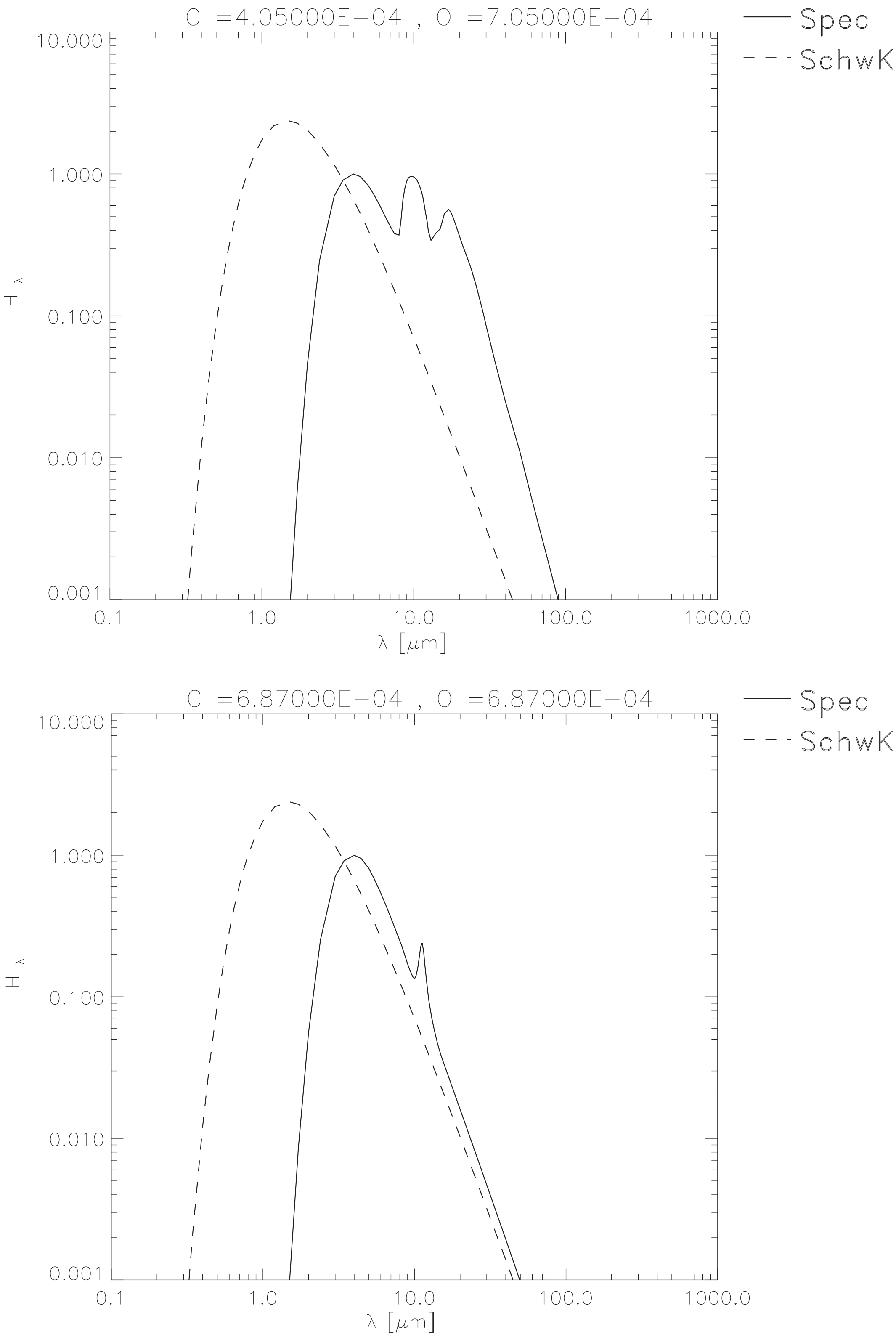


Abbildung 6.9 Spektrum einer Staubhülle und Sternspektrum (schwarzer Strahler mit $T_{eff} = 2500$ K). M-Stern (oben). S-Stern (unten). $\dot{M} = 1 \cdot 10^{-5} M_{\odot}/a$

7. Diskussion der Ergebnisse

In der vorliegenden Arbeit wurde mit Hilfe eines vorgegebenen Programms, welches an S-Sterne angepaßt wurde, die Elementzusammensetzung der Gasphase berechnet. Damit wurde untersucht, welche Atome und Moleküle in der Gasphase auftreten.

In der Gasphase von S-Sternen sind (nach H_2) CO, N_2 und C_2H_2 die häufigsten Moleküle. Silizium kommt als SiS und bei hohen Temperaturen als freies Atom vor. Die einzige Aluminiumverbindung bei niedrigen Temperaturen ist Al_2O. Bei hohen Temperaturen kommt Al nur als freies Atom vor. Eisen und Magnesium sind nur als freie Atome vorhanden. Alle restlichen Elemente haben eine zu geringe Häufigkeit, als daß sie im Zusammenhang mit der Staubbildung zu berücksichtigen wären. Titan und Zirkon sind bei hohen Temperaturen als freie Atome vorhanden.

Dann wurde die Kondensation der häufigsten Moleküle zu Festkörpern in S-Sternen untersucht. Die auftretenden Kondensate sind: Fe, FeSi, Al_2O_3, AlN, SiC, TiC und ZrC.

Als mögliche Kondensationskeime für das Wachstum der häufigen Staubkomponenten können TiO_2 bei $C/O \lesssim 0.97$ und TiC oder ZrC bei $C/O \gtrsim 0.97$ dienen.

Als wesentliches neues Ergebnis wurde gefunden, daß die Verbindung FeSi im Fall der S-Sterne ein Kondensat ist, das auch schon bei hoher Temperatur kondensiert. Diese Substanz wurde bisher im Zusammenhang mit zirkumstellarer Kondensation noch nie, abgesehen von einer kurzen Notiz in Stephens [41], diskutiert.

Diese Ergebnisse wurden in ein an S-Sterne angepaßtes Programm, ein Windmodell mit Kondensation, implementiert. In diesem Modell wurde die Kondensation von Aluminiumverbindungen nicht berücksichtigt, da sie nur eine sekundäre Staubkomponente bilden.

Es konnte gezeigt werden, daß Staubbildung in S-Sternen stattfindet. Die Hauptkondensate sind: Fe, FeSi und SiC.

In der Literatur ist mehrfach der Standpunkt vertreten worden, daß bei der Entwicklung eines Sterns vom M- zum C-Stern in der Übergangsphase (S-Stern-Phase) die Staubbildung unterbrochen ist (z.B. Wallerstein & Knapp [46]). Dies steht im Widerspruch zu den in dieser Arbeit gefundenen Ergebnissen und offensichtlich auch im Widerspruch zur Beobachtung, da in vielen Fällen bei S-Sternen die SiC-Bande bei $11.3\mu m$ beobachtet wird. Diese kann nicht schon in der M-Stern-Phase gebildet worden sein. Diese Staubsorte muß von dem S-Stern gebildet worden sein, wie es auch hier in der Modellrechnung gefunden wurde.

A. Elementhäufigkeiten

Tabelle A.1 Elementhäufigkeiten. Häufigkeiten im Sonnensystem nach Anders und Grevesse [1] mit Korrekturen nach Grevesse und Noels [15].

Z	Element		log ϵ	ϵ/ϵ_H
1	Wasserstoff	H	12.00	1.00
2	Helium	He	10.99	$9.75 \cdot 10^{-2}$
3	Lithium	Li	3.31	$2.04 \cdot 10^{-9}$
4	Beryllium	Be	1.42	$2.62 \cdot 10^{-11}$
5	Bor	B	2.88	$7.60 \cdot 10^{-10}$
6	Kohlenstoff	C	8.55	$3.55 \cdot 10^{-4}$
7	Stickstoff	N	7.97	$9.33 \cdot 10^{-5}$
8	Sauerstoff	O	8.93	$7.41 \cdot 10^{-4}$
9	Fluor	F	4.48	$3.02 \cdot 10^{-8}$
10	Neon	Ne	8.07	$1.17 \cdot 10^{-4}$
11	Natrium	Na	6.13	$2.06 \cdot 10^{-6}$
12	Magnesium	Mg	7.59	$3.85 \cdot 10^{-5}$
13	Aluminium	Al	6.48	$3.04 \cdot 10^{-6}$
14	Silizium	Si	7.55	$3.58 \cdot 10^{-5}$
15	Phosphor	P	5.57	$3.73 \cdot 10^{-7}$
16	Schwefel	S	7.27	$1.85 \cdot 10^{-5}$
17	Chlor	Cl	5.27	$1.88 \cdot 10^{-7}$
18	Argon	Ar	6.60	$3.98 \cdot 10^{-6}$
19	Kalium	K	5.13	$1.35 \cdot 10^{-7}$
20	Kalzium	Ca	6.34	$2.19 \cdot 10^{-6}$
21	Skandium	Sc	3.09	$1.23 \cdot 10^{-9}$
22	Titan	Ti	4.93	$8.60 \cdot 10^{-8}$
23	Vanadium	V	4.02	$1.05 \cdot 10^{-8}$
24	Chrom	Cr	5.68	$4.84 \cdot 10^{-7}$
25	Mangan	Mn	5.53	$3.42 \cdot 10^{-7}$
26	Eisen	Fe	7.51	$3.24 \cdot 10^{-5}$
27	Kobalt	Co	4.91	$8.06 \cdot 10^{-8}$
28	Nickel	Ni	6.25	$1.77 \cdot 10^{-6}$
29	Kupfer	Cu	4.27	$1.87 \cdot 10^{-8}$
30	Zink	Zn	4.65	$4.52 \cdot 10^{-8}$

Fortsetzung der Tabelle A.1

Z	Element		log ϵ	ϵ/ϵ_H
31	Gallium	Ga	3.13	$1.35 \cdot 10^{-9}$
32	Germanium	Ge	3.63	$4.27 \cdot 10^{-9}$
33	Arsen	As	2.37	$2.35 \cdot 10^{-10}$
34	Selen	Se	3.35	$2.23 \cdot 10^{-9}$
35	Brom	Br	2.63	$4.23 \cdot 10^{-10}$
36	Krypton	Kr	3.21	$1.61 \cdot 10^{-9}$
37	Rubidium	Rb	2.41	$2.54 \cdot 10^{-10}$
38	Strontium	Sr	2.93	$8.42 \cdot 10^{-10}$
39	Yttrium	Y	2.22	$1.66 \cdot 10^{-10}$
40	Zirkon	Zr	2.61	$4.09 \cdot 10^{-10}$
41	Niob	Nb	1.40	$2.50 \cdot 10^{-11}$
42	Molybdän	Mo	1.96	$9.14 \cdot 10^{-11}$
43	Technetium	Tc	–	
44	Ruthenium	Ru	1.82	$6.67 \cdot 10^{-11}$
45	Rhodium	Rh	1.09	$1.23 \cdot 10^{-11}$
46	Palladium	Pd	1.70	$4.98 \cdot 10^{-11}$
47	Silber	Ag	1.24	$1.74 \cdot 10^{-11}$
48	Kadmium	Cd	1.77	$5.89 \cdot 10^{-11}$
49	Indium	In	0.819	$6.59 \cdot 10^{-12}$
50	Zinn	Sn	2.14	$1.37 \cdot 10^{-10}$
51	Antimon	Sb	1.04	$1.11 \cdot 10^{-11}$
52	Tellur	Te	2.24	$1.72 \cdot 10^{-10}$
53	Jod	J	1.51	$3.23 \cdot 10^{-11}$
54	Xenon	Xe	2.23	$1.68 \cdot 10^{-10}$
55	Cäsium	Cs	1.12	$1.33 \cdot 10^{-11}$
56	Barium	Ba	2.21	$1.61 \cdot 10^{-10}$
57	Lanthan	La	1.20	$1.60 \cdot 10^{-11}$
58	Cer	Ce	1.61	$4.07 \cdot 10^{-11}$
59	Praseodym	Pr	0.777	$5.98 \cdot 10^{-12}$
60	Neodym	Nd	1.47	$2.97 \cdot 10^{-11}$
61	Promethium	Pm	–	
62	Samarium	Sm	0.966	$9.25 \cdot 10^{-12}$
63	Europium	Eu	0.543	$3.49 \cdot 10^{-12}$
64	Gadolinium	Gd	1.07	$1.18 \cdot 10^{-11}$
65	Terbium	Tb	0.335	$2.16 \cdot 10^{-12}$

Fortsetzung der Tabelle A.1

Z	Element		$\log \epsilon$	ϵ/ϵ_H
66	Dysprosium	Dy	1.15	$1.41 \cdot 10^{-11}$
67	Holmium	Ho	0.502	$3.18 \cdot 10^{-12}$
68	Erbium	Er	0.954	$8.99 \cdot 10^{-12}$
69	Thulium	Tm	0.132	$1.35 \cdot 10^{-12}$
70	Ytterbium	Yb	0.949	$8.89 \cdot 10^{-12}$
71	Luthetium	Lu	0.119	$1.32 \cdot 10^{-12}$
72	Hafnium	Hf	0.742	$5.52 \cdot 10^{-12}$
73	Tantal	Ta	-.13	$7.42 \cdot 10^{-13}$
74	Wolfram	W	0.678	$4.77 \cdot 10^{-12}$
75	Rhenium	Re	0.268	$1.85 \cdot 10^{-12}$
76	Osmium	Os	1.38	$2.42 \cdot 10^{-11}$
77	Iridium	Ir	1.37	$2.37 \cdot 10^{-11}$
78	Platin	Pt	1.68	$4.80 \cdot 10^{-11}$
79	Gold	Au	0.826	$6.70 \cdot 10^{-12}$
80	Quecksilber	Hg	1.09	$1.22 \cdot 10^{-11}$
81	Thallium	Tl	0.819	$6.59 \cdot 10^{-12}$
82	Blei	Pb	1.97	$9.33 \cdot 10^{-11}$
83	Wismuth	Bi	0.713	$5.16 \cdot 10^{-12}$
84	Polonium	Po	–	
85	Astatin	At	–	
86	Radon	Rn	–	
87	Francium	Fr	–	
88	Radium	Ra	–	
89	Actinium	Ac	–	
90	Thorium	Th	0.079	$1.86 \cdot 10^{-12}$
91	Protactinium	Pa	–	
92	Uran	U	-.49	$3.23 \cdot 10^{-13}$
93	Neptunium	Np	–	
94	Plutonium	Pu	–	
95	Americum	Am	–	
96	Curium	Cm	–	
97	Berkelium	Bk	–	
98	Californium	Cf	–	
99	Einsteinium	Es	–	
100	Fermium	Fm	–	

B. Tabelle der Polynom-Koeffizienten

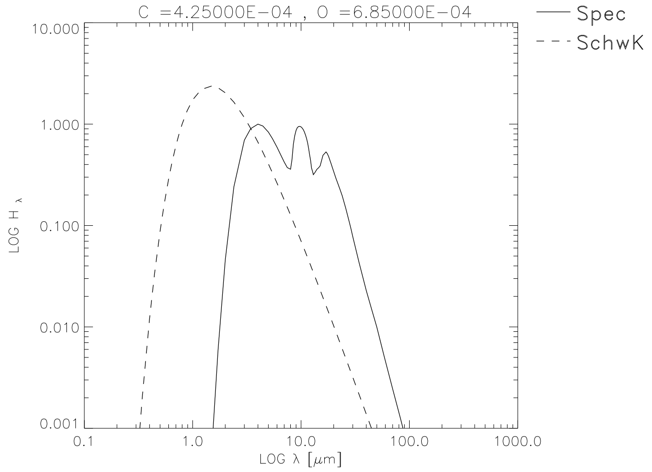
Tabelle B.1 Polynom-Koeffizienten für $\lg K_p = a + b\Theta + c\Theta^2 + d\Theta^3 + e\Theta^4$ der festen Verwindungen für den Standarddruck von 1 bar und $\Theta = 5040K/T$.

Freie Enthalpie	Fitpolynom
$G(Ca)$	7.86865D+0+(-1.39897D+0+(-6.13331D-1+(6.14629D-2+(-2.35316D-3 +5.027359D-4*THE)*THE)*THE)*THE)*THE
$G(Na_2O)$	3.61640D+1+(-1.62166D+1+(-8.66145D-1+(7.12024D-3+(-2.20401D-3 -1.43324D-3*THE)*THE)*THE)*THE)*THE
$G(Na_2O_2)$	6.91874D+1+(-3.76093D+1+(2.86341D+0+(-3.72488D-1+(1.67669D-2 -7.54256D-3*THE)*THE)*THE)*THE)*THE
$G(Na_2Si_2O_5)$	2.45029D+2+(-2.23397D+2+(3.39758D+1+(-4.21058D+0+(1.83978D-1 +3.27857D-3*THE)*THE)*THE)*THE)*THE

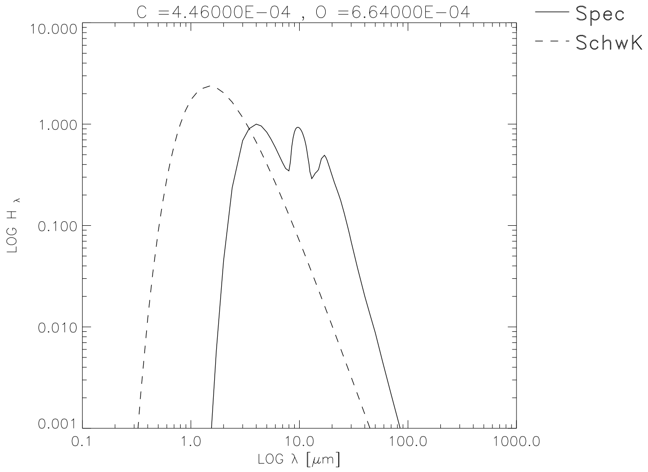
Tabelle B.2 Polynom-Koeffizienten für $\Delta G = aT^{-1} + b + cT + dT^2 + eT^3$ der festen Verwindungen für den Standarddruck von 1 bar.

Freie Enthalpie	Fitpolynom
$G(C_2)$	-3.56214D+5+(9.92673D+1+(-1.53137D-3+3.30991D-7*TG)*TG)*TG
$G(Mg_2C_3)$	-5.64463D+5+(1.62336D+2+(-2.55957D-3+6.13189D-7*TG)*TG)*TG
$G(Mg_2SI)$	-1.96626D+5+(9.25351D+1+(-2.69331D-3+6.17725D-7*TG)*TG)*TG
$G(Si)$	-1.06916D+05 +(3.46264D+1 -5.98024D-4 *TG)*TG
$G(Al)$	-7.82706D+4+(3.376794D+1+(-1.65750D-3-1.21873D-7*TG)*TG)*TG
$G(Al_4C_3)$	-8.78191D+5+(2.54547D+2+(-2.66123D-3-9.45492D-7*TG)*TG)*TG
$G(NiS_2)$	-2.66982D+5+(1.08176D+2-1.96812D-3*TG)*TG
$G(ZrC)$	-3.67013D+5+(7.53308D+1+(-1.13040D-3+4.67836D-7*TG)*TG)*TG
$G(C)$	2.08170D+5/TG-1.72258D+5+(3.87277D+1+(-2.94717D-4 +4.23326D-8*TG)*TG)*TG
$G(SiC)$	6.68748D+4/TG-2.96740D+5+(7.645711D+1+(-8.17922D-4 +1.30155D-7*TG)*TG)*TG
$G(Si_3N_4)$	1.41998D+6/TG-9.61105D+5+(2.53036D+2+(-2.90976D-3 +2.45309D-7*TG)*TG)*TG
$G(FeSi)$	8.00839D+4/TG-2.26367D+5+(7.45330D+1+(-1.91166D-3 -5.75113D-08*TG)*TG)*TG
$G(FeSi_2)$	1.38518D+5/TG-3.33576D+5+(1.12338D+2+(-8.50819D-6 +7.64954D-9*TG)*TG)*TG
$G(Fe_3C)$	4.17107D+5/TG-4.66603D+5+(1.51898D+2+(-9.24529D-03+(-1.73424D-7 +1.31815D-10*TG)*TG)*TG)*TG
$G(FeSiO_3)$	-5.26506D+5/TG-6.68373D+05+(1.73783D+2+(-2.13971D-3 +4.94433D-7*TG)*TG)*TG
$G(Ca_2SiO_4)$	5.91397D+4/TG-9.82384D+5+(2.41633D+2+(-4.26900D-3 +2.20784D-7*TG)*TG)*TG
$G(Ca_2MgSi_2O_7)$	1.31975D+5/TG-1.68718D+6+(4.22753D+2+(-6.38360D-3 +2.78014D-7*TG)*TG)*TG
$G(CaC_2)$	-6.34669D+4/TG-3.99313D+5+(9.70548D+1+(-1.90150D-03 +1.18706D-07*TG)*TG)*TG
$G(Na_2SiO_3)$	4.63483D+4/TG-7.12298D+5+(2.06928D+2-4.88925D-3*TG)*TG
$G(NaAlO_2)$	2.86473D+5/TG-4.95145D+5+(1.39295D+2+(-2.30017D-3 -8.11209D-8*TG)*TG)*TG
$G(Na_2S)$	-5.70629D+5/TG-2.05053D+5+(8.88184D+1+(-2.37895D-3 +1.73672D-7*TG)*TG)*TG
$G(Ni_3C)$	-2.97826D+5/TG-4.61865D+5+(1.41048D+2+(-1.15357D-3+(9.11280D-8 -5.01244D-11*TG)*TG)*TG)*TG
$G(TiC)$	-1.58797D+5/TG-3.27835D+5+(7.61469D+1+(-8.91193D-4 +7.05158D-8*TG)*TG)*TG
$G(Mg_2TiO_4)$	9.74827D+03/TG-9.40869D+5+(2.46385D+2+(-4.41047D-3 +2.92788D-7*TG)*TG)*TG
$G(CV_2)$	4.41271D+5/TG-4.48073D+5+(1.15578D+2+(1.31248D-03 -3.16894D-7*TG)*TG)*TG

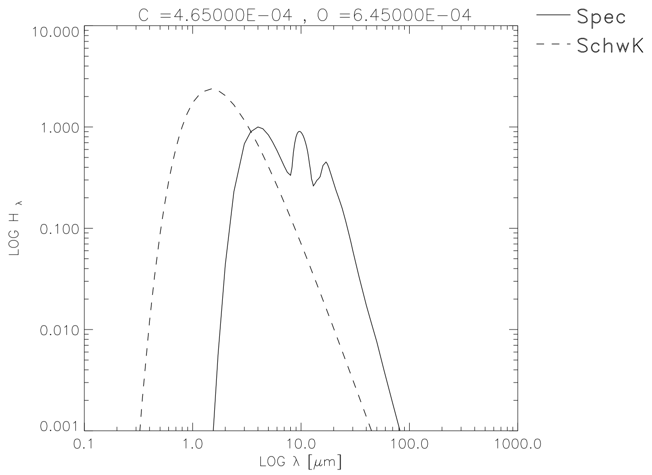
C. Spektren



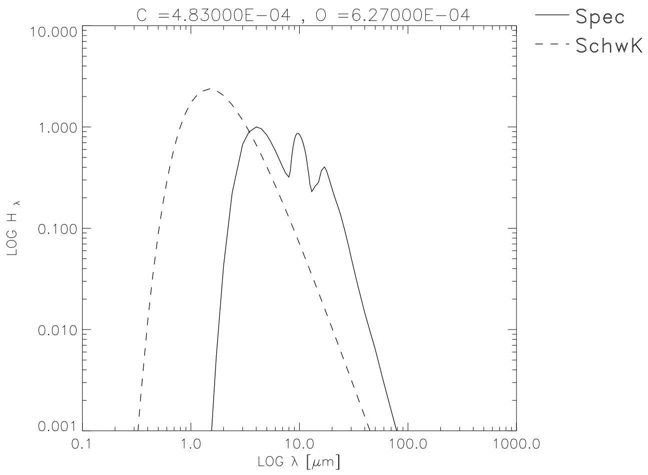
C =4.25000E-04 , O =6.85000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0



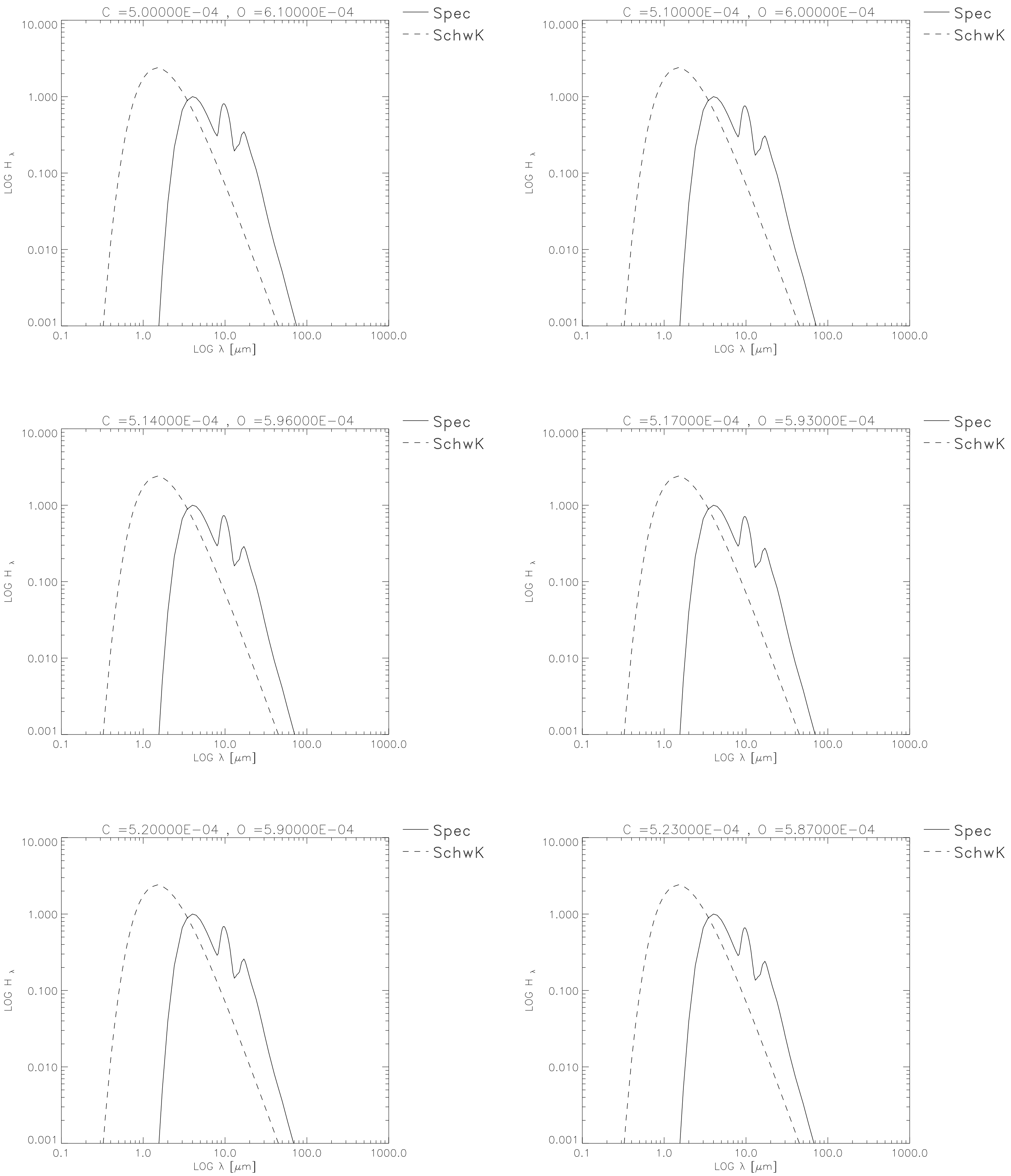
C =4.46000E-04 , O =6.64000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

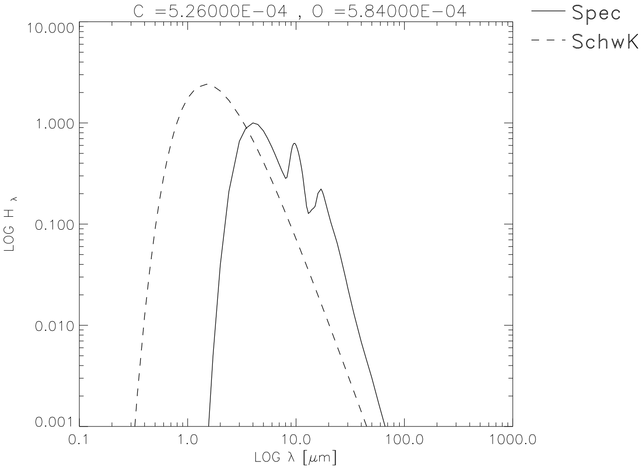


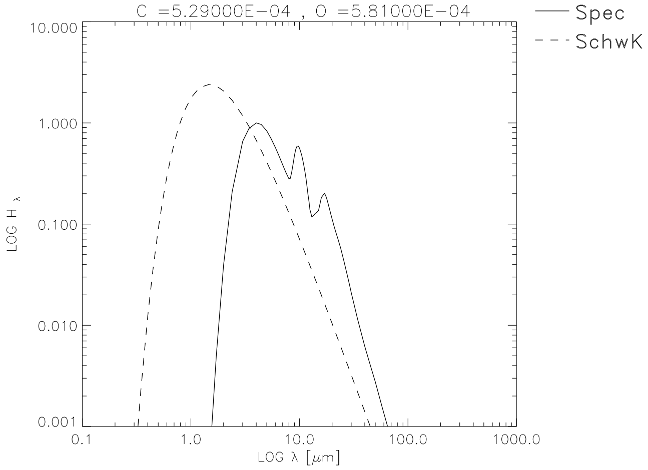
C =4.65000E-04 , O =6.45000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

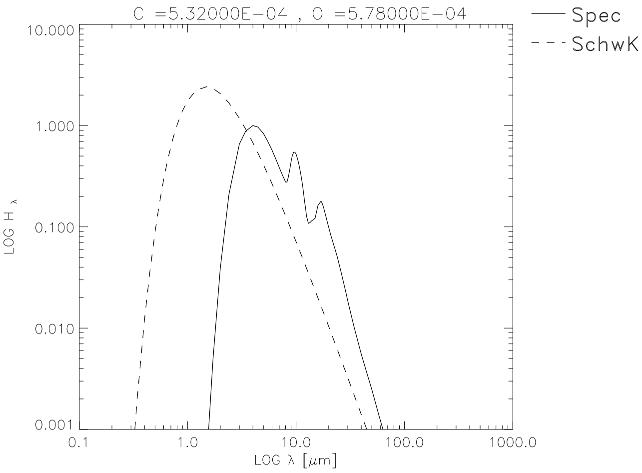


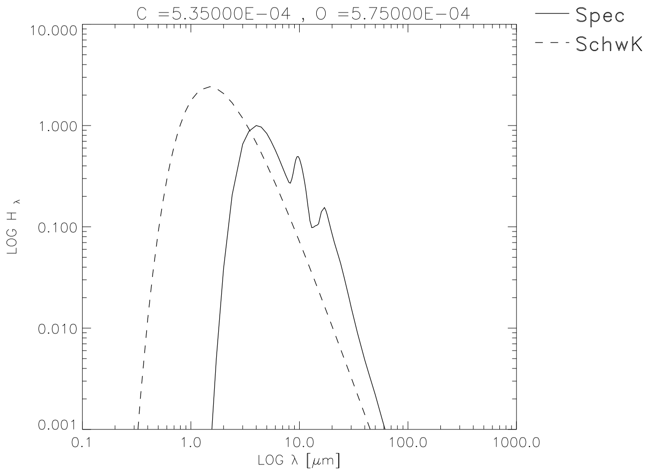
C =4.83000E-04 , O =6.27000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

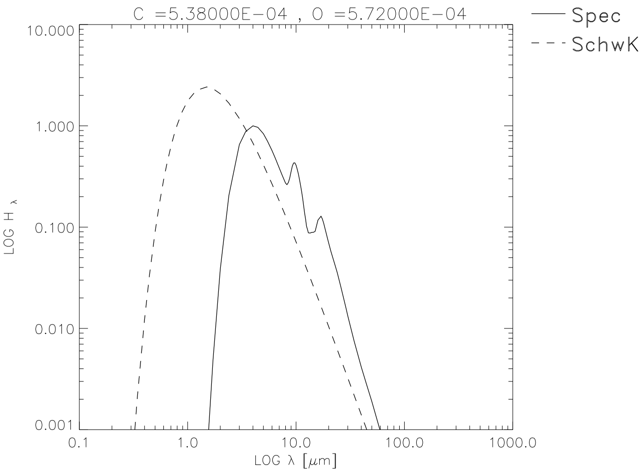

C =5.00000E-04 , O =6.10000E-04
C =5.10000E-04 , O =6.00000E-04
C =5.14000E-04 , O =5.96000E-04
C =5.17000E-04 , O =5.93000E-04
C =5.20000E-04 , O =5.90000E-04
C =5.23000E-04 , O =5.87000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

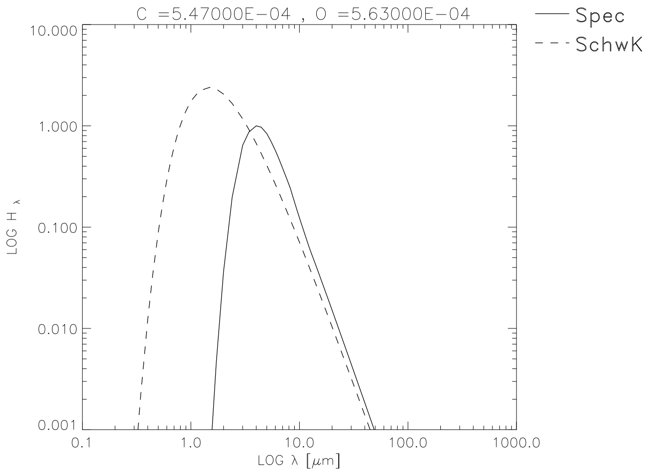

C =5.26000E-04 , O =5.84000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

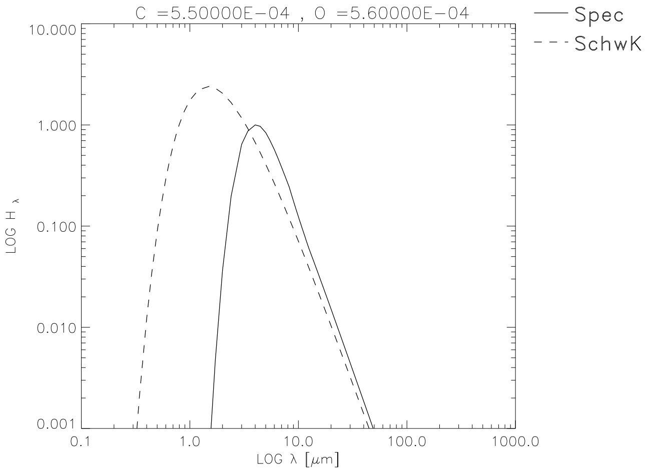

C =5.29000E-04 , O =5.81000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

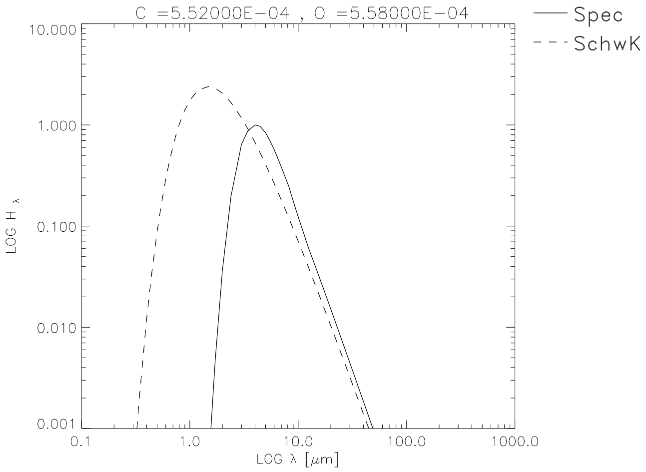

C =5.32000E-04 , O =5.78000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

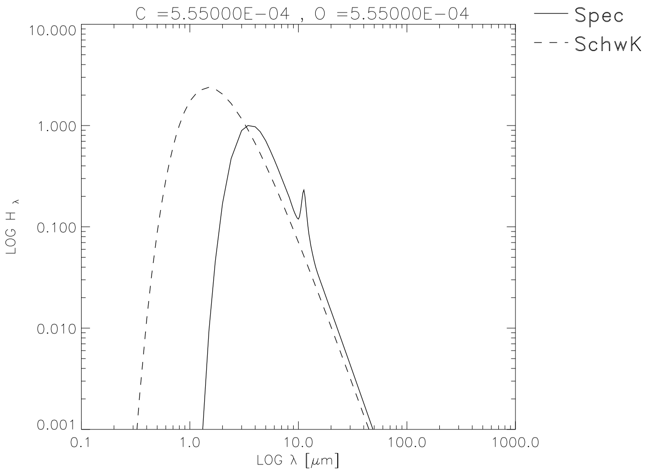

C =5.35000E-04 , O =5.75000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

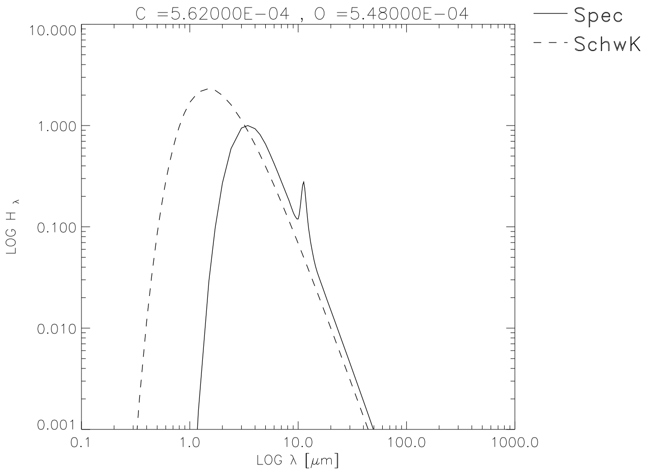

C =5.38000E-04 , O =5.72000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

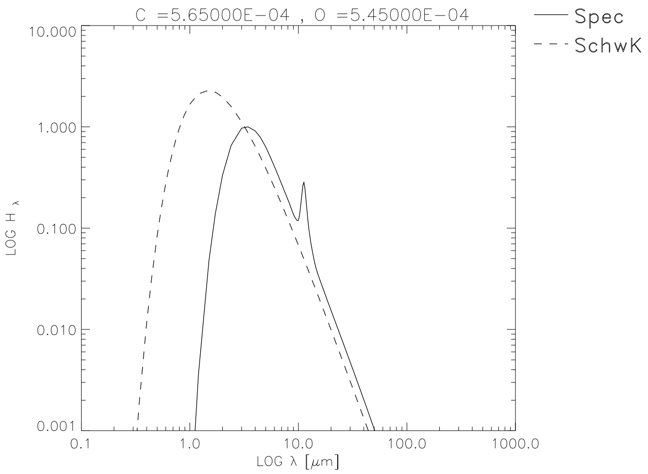

C =5.47000E-04 , O =5.63000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]

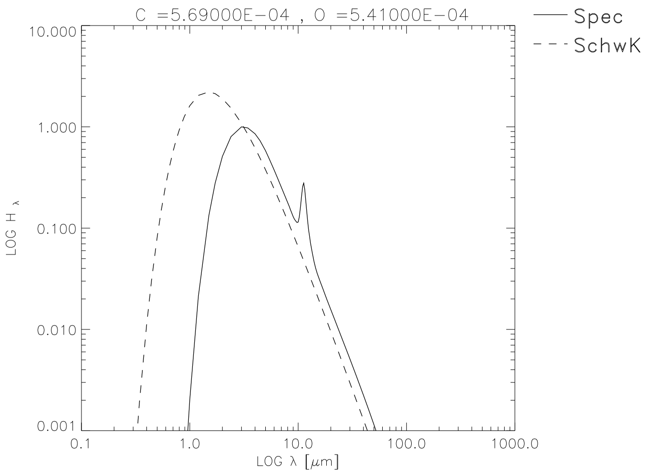

C =5.50000E-04 , O =5.60000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

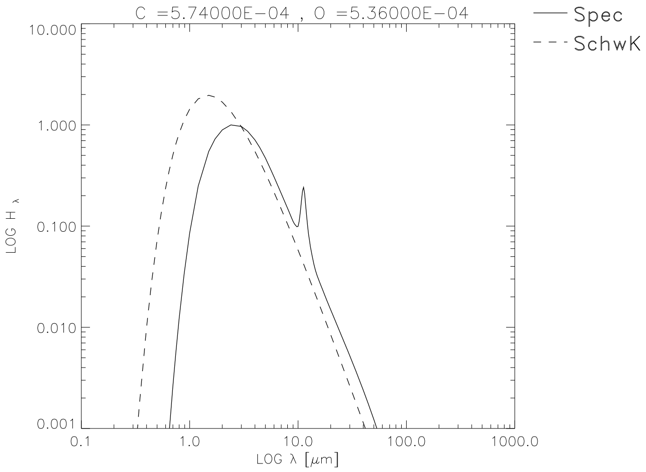

C =5.52000E-04 , O =5.58000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

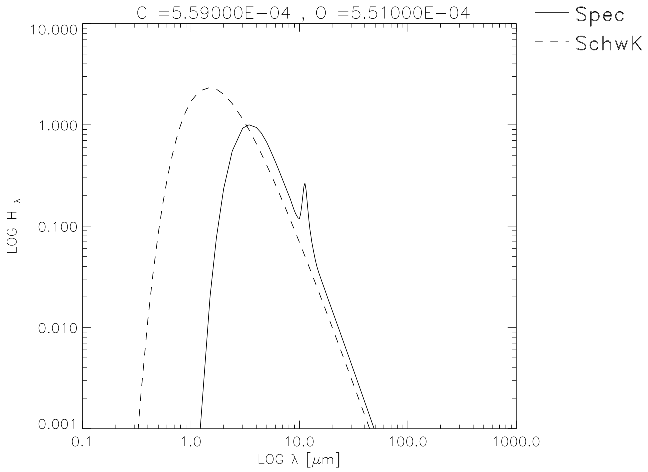

C =5.55000E-04 , O =5.55000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

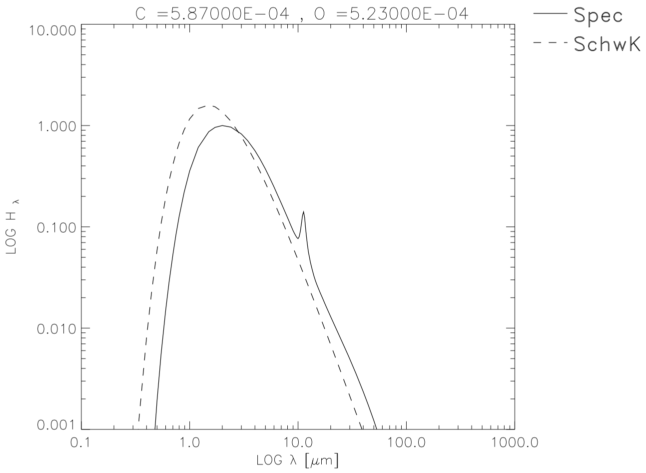

C =5.62000E-04 , O =5.48000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

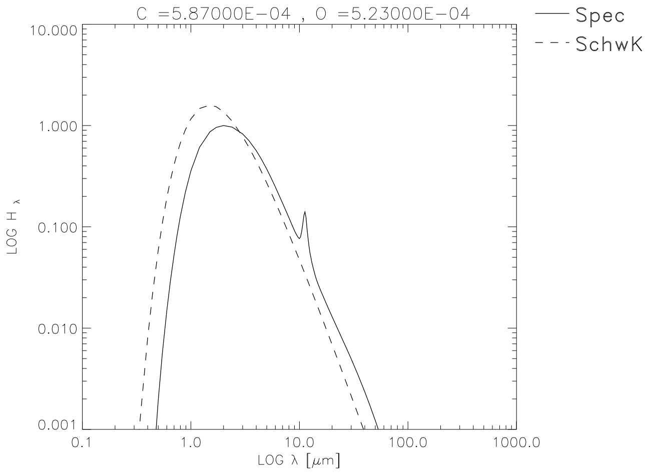

C =5.65000E-04 , O =5.45000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

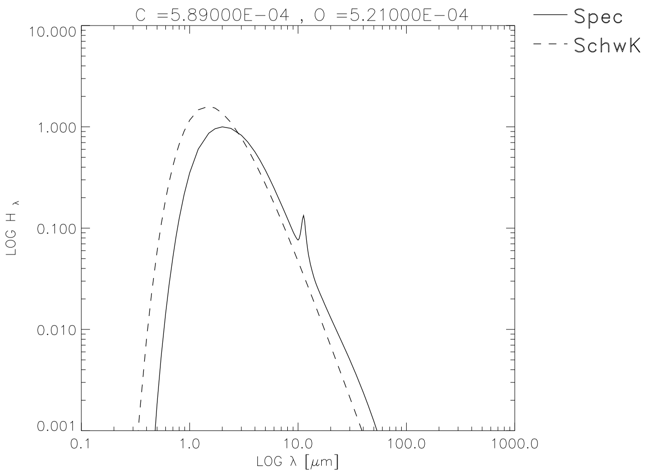

C =5.69000E-04 , O =5.41000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

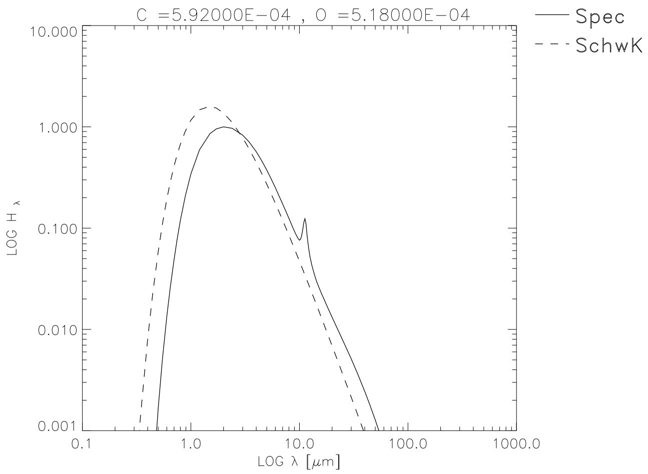

C =5.74000E-04 , O =5.36000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

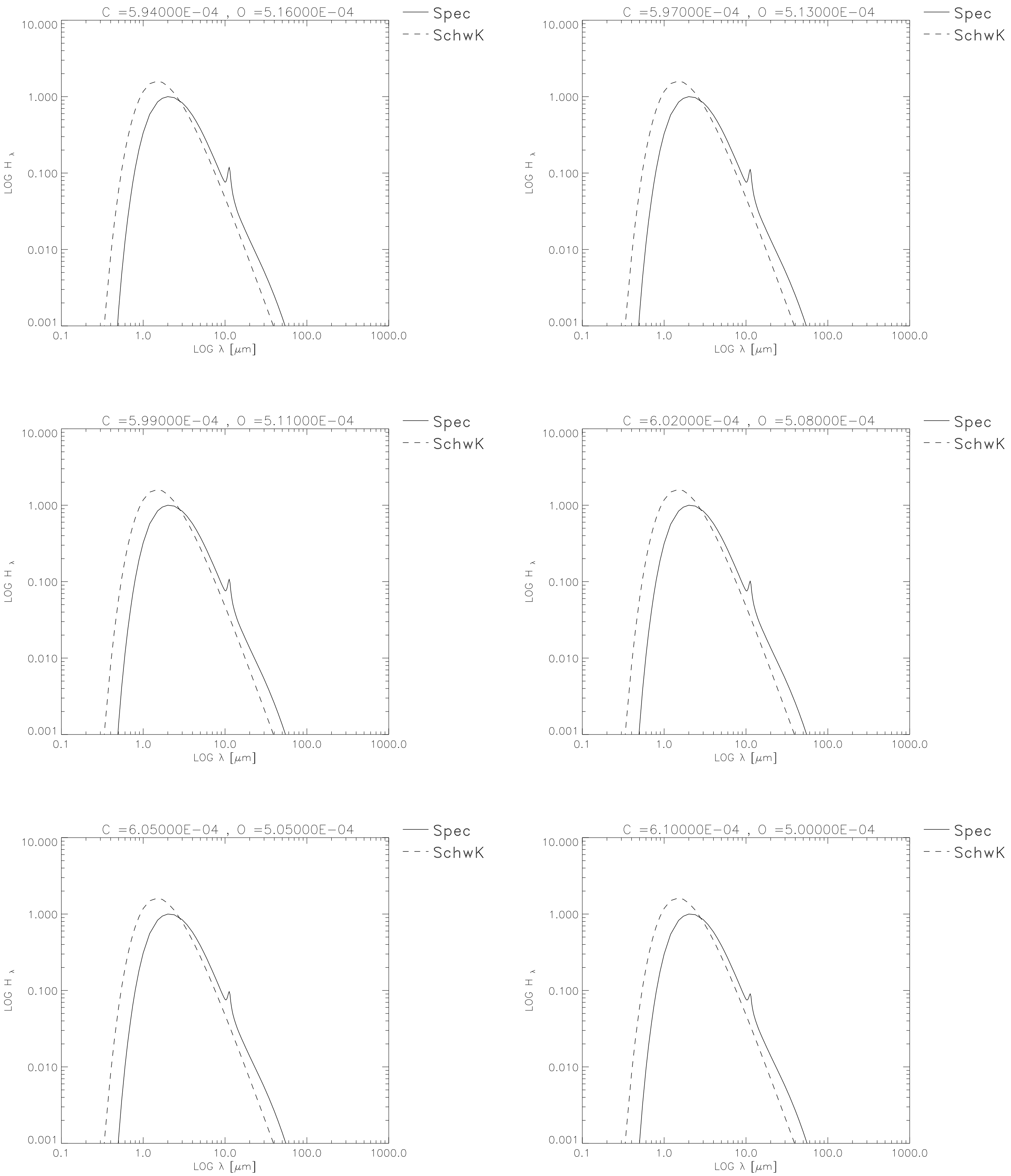

C =5.59000E-04 , O =5.51000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

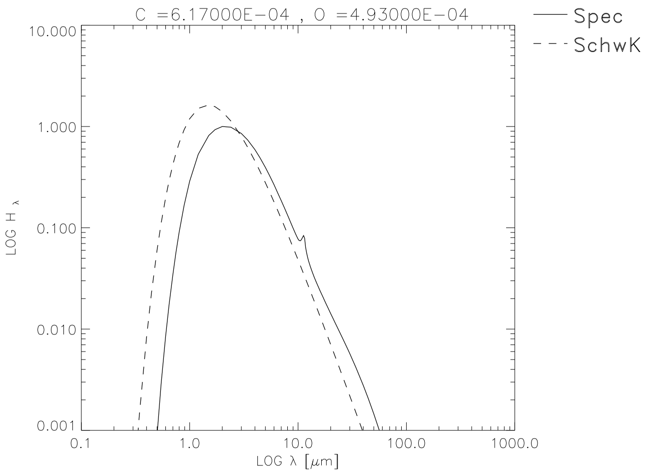

C =5.87000E-04 , O =5.23000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

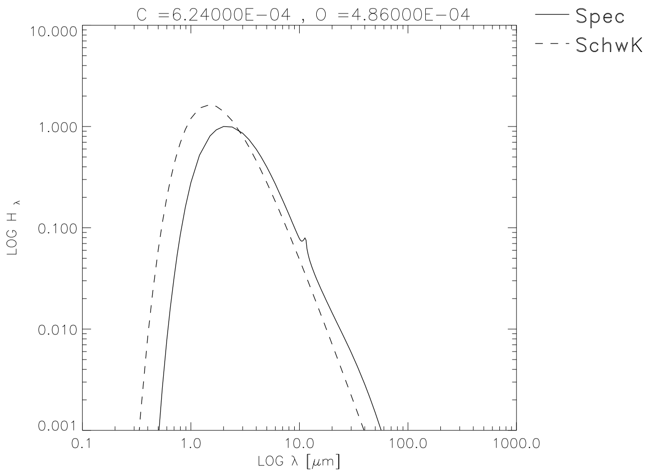

C =5.87000E-04 , O =5.23000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

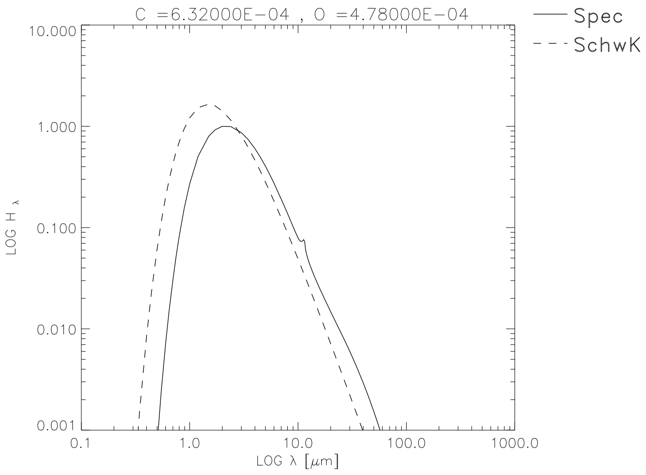

C =5.89000E-04 , O =5.21000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

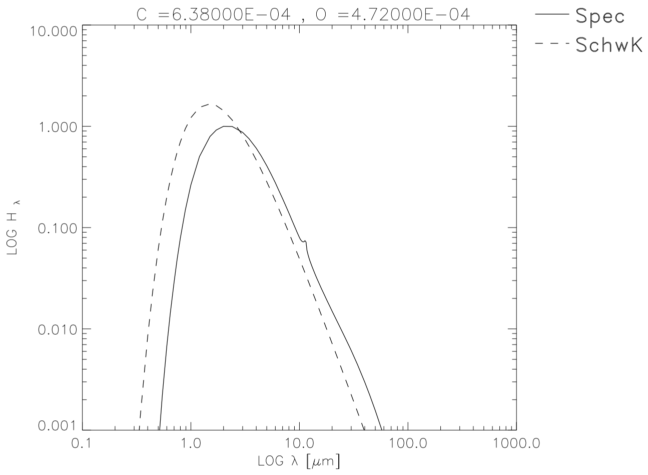

C =5.92000E-04 , O =5.18000E-04
Spec
SchwK
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
LOG H λ
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0
LOG λ [μm]

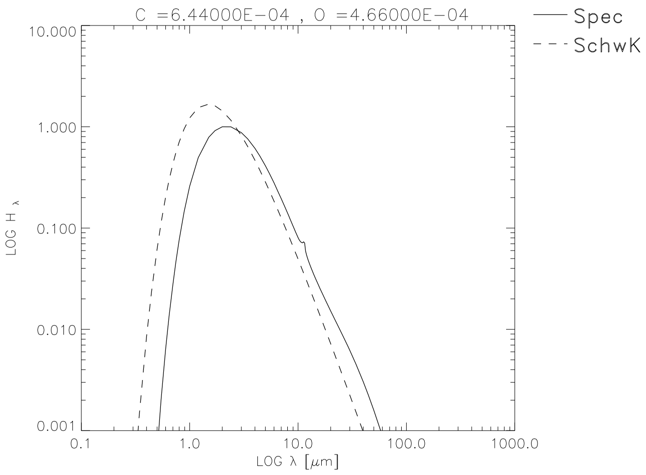

C =5.94000E-04 , O =5.16000E-04
C =5.97000E-04 , O =5.13000E-04
C =5.99000E-04 , O =5.11000E-04
C =6.02000E-04 , O =5.08000E-04
C =6.05000E-04 , O =5.05000E-04
C =6.10000E-04 , O =5.00000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

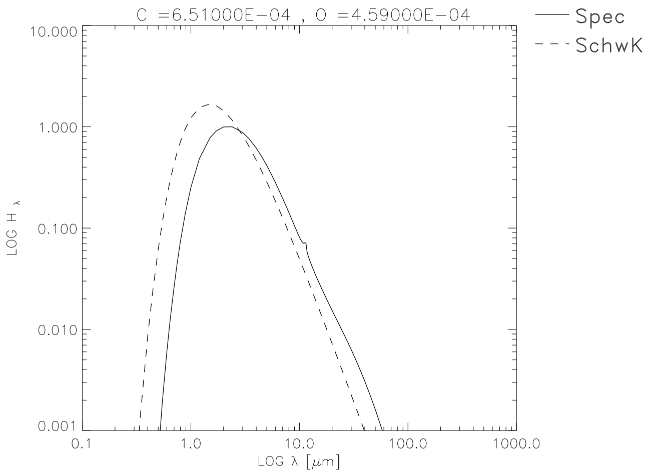

C =6.17000E-04 , O =4.93000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0


C =6.24000E-04 , O =4.86000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0


C =6.32000E-04 , O =4.78000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0


C =6.38000E-04 , O =4.72000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0


C =6.44000E-04 , O =4.66000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0


C =6.51000E-04 , O =4.59000E-04
Spec
SchwK
LOG H λ
LOG λ [μm]
10.000
1.000
0.100
0.010
0.001
0.1
1.0
10.0
100.0
1000.0

Literaturverzeichnis

[1] Anders E., Grevesse N. (1989) Abundances of the elements: Meteoritic and solar. Geochimica et Cosmochimica Acta, **53**, 197–214

[2] Atkins P. W. (1987) Physikalische Chemie. VCH Verlagsgesellschaft mbH.

[3] Bell K. R., Lin D. N. C. (1994) Using FU Orionis outburst to constrain self-regulated protostellar disk models. Astrophys. J., **427**, 987–1004

[4] Bernatowicz T. J., Cowsik R., Gibbons P., Lodders K., Fegley B., Amari S, und Lewis R.S. (1996) Constraints on stellar grain formation from presolar graphite in the Murchison meteorite. Astrophys. J., **472**, 760–782

[5] Binnewies M. (1996) Chemische Gleichgewichte. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim

[6] Bowen G. H. (1988) Dynamical modeling of long-period variable star atmospheres. Astrophys. J., **329**, 299–317

[7] Cherchneff I., Barker J. R., und Tielens A.G.G.M. (1992) Polycyclic aromatic hydrocarbon formation in carbon-rich stellar envelopes. Astrophys. J., **401**, 269–287

[8] Dominik C., Gail H.-P., Sedlmayr E., Winters J.M. (1990) HR diagrams for dust driven winds around C-stars. Astron. Astrophys., **240**, 365–375

[9] Dorschner J., Begemann B., Henning Th., Jäger C. und Mutschke H. (1995) Steps toward interstellar silicate mineralogy. II. Study of Mg-Fe-silicate glasses of variable composition. Astron. Astrophys., **300**, 503

[10] Draine B. T. (1985) Tabulated optical properties of graphite and silicate grains. Astrophys. J. Suppl., **57**, 587–594

[11] Fleischer A. J., Gauger A., Sedlmayr E. (1991) Generation of shocks by radiation pressure on newly formed circumstellar dust. Astron. Astrophys., **242**, L1–L4

[12] Fließbach T. (1995) Statistische Physik. Spektrum Akademischer Verlag.

[13] Gail H.-P., Sedlmayr E. (1999) Mineral formation in stellar winds. I. Condensation sequence of silicate and iron in stationary oxygen rich outflows. Astron. Astrophys., **347**, 594–616

[14] Gollub G., Ortega J. (1992) Scientific Computing and Differential Equations, An Introduction to Numerical Methods. Academic press, INC.

[15] Grevesse N., Noels A. (1993) Cosmic abundances of the elements. In: Origin and Evolution of the Elements, N. Prantzos, E. Vangioni-Flam und M. Cassé M. (eds.), Cambridge University Press, Cambridge, p. 15–25

[16] Grossman L. (1972) Condensation in the primitive solar nebula. Geochimica et Cosmochimica Acta, **36**, 597–619

[17] Groenewegen M.A.T, van den Hoek L.B., und de Jong T. (1995) The evolution of galactic carbon stars. Astron. Astrophys., **293**, 381–395

[18] Hashimoto A. (1990) Evaporation kinetics of forsterite and implications for the early solar nebula. Nature, **347**, 53–55

[19] Iben Jr. I. (1991) Single and Binary star evolution. The Astrophys. J. Suppl., **76**, 55–114

[20] Iben Jr. I., Renzini A. (1983) Asymptotic Giant Brach evolution and beyond. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, **21**, 271–342

[21] Lattimer J. M., Schramm D. N. und Grossman L. (1978) Condensation in supernova ejecta and isotopic anomalies in meteorites. Astrophys. J., **219**, 230–249

[22] Lide D.R. (1996) CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press, Boca Raton etc.

[23] Little Marenin I. R. (1986) Carbon stars with silicate dust in their circumstellar shells. Astrophys. J., **307**, L15–19

[24] Lodders K. und Fegley B. (1995) The origen of circumstellar silicon grains found in meteorites. Meteoritics, **30**, 661–678

[25] Loup C., Forveille T., Omont A., Paul J.F. (1993) CO and HCN observations of circumstellar envelopes. A catalogue - mass loss rates and distribitions. Astron. Astrophys. Suppl., **99**, 291–377

[26] Lucy L.B. (1971) The formation of resonance lines in extended and expanding atmospheres. Astrophys. J., **163**, 95–110

[27] Lucy L.B. (1976) Mass loss by cool Carbon Stars. Astrophys. J., **205**, 482–491

[28] Maeder A. und Meynet G. (1989) Grids of evolutionary models from 0.85 to 120 $M_{\odot}$: observational tests and the mass limits. Astron. Astrophys., **210**, 155–173

[29] Mathis J. S., Rumpl W., Nordsieck K. H. (1977) The size distribution of interstellar grains. Astrophys. J., **217**,425–433

[30] Moore W., Hummel D. (1983) Physikalische Chemie.

[31] Nagahara H., Ozawa K. (1996) Geochimica et Cosmochimica Acta, **60**, 1445

[32] Pégourié B. (1988) Optical properties of alpha silicon carbide. Astron. Astrophys., **194**, 335–339

[33] Saxena S. K., Eriksson G. (1986) Chemistry of the Formation of the Terrestrial Planets. In: Chemistry and Physics of Terrestrial Planets, Saxena S. K. (ed.), Springer, New York, p. 39–105

[34] Skinner C. J., Griffin I., Whitmore B. (1990) Red giants with unusual dust shells. I - The database. Royal Astronomical Society, Monthly Notices, **243**, 78–86

[35] Schaller G., Schaerer D., Meynet G., und Maeder A. (1992) New grids of stellar models from 0.8 to 120 $M_\odot$ at $Z = 0.020$ and $Z = 0.001$. Astron. Astrophys. Suppl. Ser., **96**, 269–331

[36] Schäfer K. (1968) Landolt. Börnstein. Zahlenwerte und Funktionen, Bd.**5b**, Springer Verlag, Berlin.

[37] Schiavon R. P., Barbuy B., und Singh P. D. (1997) The FeH wing-ford band in spektra of M stars. Astrophys. J., **484**, 499–510

[38] 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. 237–264

[39] Sharp C.M., Huebner W.F. (1990) Molecular equilibrium whit condensation. Astrophys. J. Suppl., **72**, 417–431

[40] Smith V.V. und Lambert D.L. (1990) The chemical composition of red giants. Further CNO isotopic and *s*-process abundances in thermally pulsing asymptotic giant branch stars. Astrophys. J. Suppl., **72**, 387–416

[41] Stephens J. R. (1989) Experimental data on the nucleation and growth of solid particles from high-temperature gas mixtures. In: Solid state astrophysics, Bussoletti E. & Strazulla G.(eds.), North Holland Publ., Amsterdam, p.391

[42] Stoer, Bulirsch (1990) Numerische Mathematik 2. Dritte Auflage. Springer-Verlag.

[43] Stull D. H., Prophet H. (1971) JANAF Thermochemical Tables (2nd. ed.). NSRDS-NBS, **37**, Nat. Bur. Stand. (US)

[44] Treffers R. und Cohen M. (1974) High resolution spectra of cool stars in the 10 and 20 micron regions. Astrophys. J., **188**, 545–552

[45] Tsuji T. (1973) Molecular Abundances in Stellar Atmospheres. II. Astron. Astrophys., **23**, 411–431

[46] Wallerstein G., Knapp G. R. (1998) Carbon stars. Annu. Rev. Astron. Astrophys., **36**, 369–433

[47] Willems F. J., de Jong T. (1986) Carbon stars whit oxygen-rich circumstellar dust shells: Observational evidence for the onset of carbon star phase. Astrophys. J., **309**, L39–42

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. H.-P. Gail für die Bereitstellung des Themas und die engagierte Betreuung. Seine unermüdliche Unterstützung und Geduld bezüglich der vielen Fragen sowie sein hilfreicher Rat haben maßgeblich zum Gelingen der Arbeit beigetragen.

Danken möchte ich auch Herrn Prof. W. Duschl für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Sehr dankbar bin auch Herrn Rainer Kürschner für die vielen und geduldigen Antworten und seine Hilfe im Hard- und Software-Bereich sowie das Durchlesen der Arbeit.

Den Mitarbeitern des Instituts für Theoretische Astrophysik, insbesondere Herrn D. Gad El-Mawla und Herrn P. Müller, danke ich für die nette und freundliche Arbeitsatmosphäre.

Jan Schrage und Michael Wehrstedt danke ich für die hilfreichen Gespräche.

Gunter Kaliwoda, Sebastian Els, Mario Bitter, Silke May und Christian Knoechel danke ich für ihre Freundschaft und Hilfestellung.

Jan Th. Petersen danke ich für die orthographische Überarbeitung des Manuskripts.

Besonderen Dank möchte ich auch Thilo für die Unterstützung und Geduld während meines gesamten Studiums aussprechen.

Meinen Eltern Pablo und Angelica Ferrarotti danke ich herzlich für alles, was sie für mich getan haben und was sie mir ermöglichten .