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

vorgelegt von
Dipl.–Phys. Frédéric FINOCCHI
aus Conflans Sainte Honorine (Frankreich)

Tag der mündlichen Prüfung: 19.06.1996

Thema

Chemische Reaktionen und Staubzerstörung in protoplanetaren Akkretionsscheiben

Gutachter: Priv.-Doz. Dr. Hans–Peter GAIL

Prof. Dr. Bernhard WOLF

Frontispiz: Dieses Bild des protostellaren Objektes HH–30 zeigt einen von einer Staubscheibe umgebenen, neugebildeten Protostern. Das Licht des Protosterns beleuchtet die obere und untere Fläche der Scheibe. Dadurch wird die Scheibe sichtbar, während der Stern selbst in deren dichten Regionen verborgen ist. Der rote Jet kommt aus den innersten Bereichen der Scheibe und möglicherweise vom Protostern selbst. Dieses Bild vom *Hubble Space Telescope* zeigt zum ersten Mal, daß Jets sich sowohl über mehrere 1000 astronomische Einheiten vom Protostern weg ausbreiten, als auch, daß sie innerhalb eines engen Bündels bleiben. Dieser Protostern befindet sich ca. 450 Lichtjahre entfernt im Sternbild Stier.

Kannst du die Bande der Sieben Sterne zusammenbinden
oder das Band des Orion auflösen?
Das Buch Hiob

Plus les hommes seront éclairés, plus ils seront libres.
Voltaire

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Scheibenähnliche Strukturen gehören zu den häufigsten Objekten im Universum, z.B. die Spiralgalaxie NGC 4565, die von der Seite aus beobachtet wird. Sie zeigt eine Scheibenstruktur. Unsere Galaxie würde für einen äußeren Beobachter genauso aussehen. Ebenso sind die planetaren Ringe, wie die Ringe des Saturn, oder der schwache Ring von Uranus, schöne Beispiele dafür.

Es wird generell angenommen, daß Sterne durch das Kollabieren einer Molekülwolke entstehen. Betrachten wir eine unregelmäßige Molekülwolke, die einen Drehimpuls besitzt. Aufgrund der Gravitationskräfte kollabiert die Wolke im Laufe der Zeit und Zentrifugalkräfte führen zur Bildung einer scheibenähnlichen Struktur. So eine *Akkretionsscheibe* wird deshalb *protostellare* Akkretionsscheibe genannt. Im Zentrum dieser Scheibe befindet sich ein Protostern (eine „Ursonne"). Viskose Kräfte in der Scheibe, oder Prozesse, die auf eine ähnliche Weise wirken, verursachen durch Energieverlust eine einwärts gerichtete Spiralbewegung der Materie d.h. einen Akkretionsprozeß. Aufgrund dieses Akkretionsprozesses wächst der Protostern schnell. Wenn sich der größte Teil der Gesamtmasse im Zentralstern befindet, spricht man von einer *protoplanetaren* Akkretionsscheibe. In dieser Scheibe können sich durch Stöße zuerst Staubteilchen von Mikrometergröße bilden. Diese Teilchen wachsen durch Koagulationsprozesse bis Millimeter– und Zentimetergröße an. Schließlich können sich in einer späteren Phase Planetoïden und Planeten bilden.

Es besteht kein Zweifel daran, daß viele junge Sterne von einer Akkretionsscheibe umgeben sind. Eine genaue Analyse der Infrarotstrahlung, die von diesen Objekten ausgestrahlt wird, zeigt eine stärkere Emission als die, die man von einem einzigen Stern erwarten könnte. Es wird vermutet, daß diese Emission von einer Akkretionsscheibe kommt [Beckwith *et al.* 1990]. Das inzwischen berühmt gewordene Objekt β Pictoris ist zur Zeit noch immer der beste Kandidat für die Bildung eines äußeren Sonnensystems. In diesem Fall wird die Existenz einer Staubscheibe um einen jungen (A5 ?) Zentralstern beobachtet. Es ist noch nicht klar, ob wir vor einem jungen Sonnensystem oder einer sich langsam auflösenden Scheibe stehen [Pringle 1981]. In diesem Fall haben wir es wahrscheinlich mit einer protoplanetaren Akkretionsscheibe zu tun (der größte Teil der Gesamtmasse befindet sich im Zentralstern).

Die Entwicklung einer protoplanetaren Akkretionsscheibe erfolgt hauptsächlich in drei Phasen. Diese Phasen sind eventuell zeitlich nicht deutlich getrennt oder sie gehen fließend ineinander über.

- Während der ersten Phase wird eine protostellare Scheibe durch die einfallende Materie aus der umgebenden Molekülwolke aufgebaut. Diese Phase dauert etwa 10^5 Jahre. Der größte Teil der Gesamtmasse befindet sich noch in der Scheibe und es existiert noch kein richtiger Protostern.

- Viskose Prozesse oder ähnlich wirkende Prozesse verursachen die Akkretion der Scheibenmaterie auf den neu gebildeten Protostern. In dieser *viskosen* Phase kommt wenig oder gar keine Materie mehr von der umgebenden Molekülwolke. Der Zentralstern wird immer massiver. Die Scheibe ist jetzt dünn geworden (d.h. ihre Dicke ist in jedem Punkt viel kleiner als die Entfernung vom Protostern) und ihre Masse ist gegenüber der Zentralmasse vernachlässigbar. Diese Phase dauert ca. 10^5 Jahre.

- Die letzte Phase ist gekennzeichnet durch das langsame Verschwinden ($\approx 10^7$ Jahre) der Scheibe. Die Ursache dafür kann der Sternwind des neu gebildeten Sterns sein. Es ist durchaus möglich, daß sich während der zweiten Phase durch Zusammenklumpen des Staubs und der eisüberzogenen Staubteilchen Planetesimale der Größe $\geq$1 km gebildet haben. In diesem Fall entsteht während der dritten Phase ein Sonnensystem.

Unser Sonnensystem könnte vor etwa 5 Milliarden Jahren auf diese Weise aus einer Akkretionsscheibe entstanden sein. Ein wichtiger Hinweis dafür ist, daß die Bahnen fast aller Objekte unseres Sonnensystems sich in einer Ebene (Ekliptik) befinden. Andere wichtige Hinweise sind in Lissauer (1993) zu finden.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Modellierung der chemischen Reaktionen, der Verdampfung von Eismänteln und der Staubverdampfung in protoplanetaren Akkretionsscheiben während der viskosen Phase der Scheibenentwicklung. Die chemischen Reaktionen, die Staubverdampfung und –bildung spielen eine wesentliche Rolle für die Struktur und die zeitliche Entwicklung der Akkretionsscheiben. Der Einfluß der chemischen Reaktionen zusammen mit der Staubverdampfung und –bildung bestimmen die chemische Zusammensetzung des Gas–Staub–Gemisches und diese bestimmt die Opazität der Gas–Staub–Mischung. Die Opazität wiederum bestimmt die Gastemperatur. Die aus chemischen Prozessen resultierenden Temperaturänderungen beeinflußen dann ihrerseits die chemischen Prozesse und die Staubbildung. Diese wechselseitige Koppelung zwischen Chemie und Opazität ist ein wichtiger Parameter und entscheidet, ob eine Scheibe stabil oder instabil ist (d.h. ob eine Scheibe überhaupt existieren kann). Diese Instabilität ist ein zur Zeit sehr wichtiges Modell, um die Leuchtkraftvariationen bestimmter veränderlicher Sterne zu klären. Die zeitliche und räumliche sowie die chemische Entwicklung der Akkretionsscheibe sind, wie schon erwähnt, von grundlegender Bedeutung für die Planetenentstehung, insbesondere für die Entstehung unseres Sonnensystems.

Im Rahmen dieser Arbeit soll untersucht werden, welche chemischen Prozesse zwischen Atomen, Molekülen und Ionen in der Akkretionsscheibe ablaufen, und wie die damit verbundenen, verschiedenen physikalischen Parameter (wie die Temperatur) aussehen.

2 Das interstellare Medium

Das interstellare Medium kann als Ozean gesehen werden, in dem sich die ganze Galaxie befindet. Es besteht hauptsächlich aus kühlem Gas und zeigt aufgrund der Gravitationskraft und der Rotation eine flache Struktur. Dieses Medium ist das eigentliche Materiereservoir für alle Himmelskörper, die entstehen, eine gewisse Zeit existieren und dann wieder verschwinden, wie Sterne und Planeten. Die Beobachtungen haben gezeigt, daß das interstellare Medium eine sehr komplizierte und inhomogene Struktur hat. Verschiedene Prozesse und Ereignisse wie Heizungs– und Kühlungsprozesse, Explosionen, Spiralwellen und Instabilitäten bestimmen seine Struktur und werden ausführlich theoretisch untersucht.

2.1 Interstellare Wolken

In der Einleitung haben wir den Grundprozeß erwähnt, der zu einer scheibenähnlichen Struktur führen kann. Am Anfang „kondensiert" ein Teil einer Molekülwolke und, wenn dieser Teil einen Drehimpuls besitzt, kann die Kontraktion nicht rein radial erfolgen, sondern es muß sich daraus eine Scheibe bilden. Die chemische Zusammensetzung einer protoplanetaren Akkretionsscheibe ist also mit der der ursprünglichen Molekülwolke eng verbunden. Wir beginnen deswegen mit einer ausführlichen Beschreibung der chemischen Zusammensetzung und der physikalischen Eigenschaften von Molekülwolken. Verschiedene Arten von Wolken sind im interstellaren Medium zu erkennen [van Dishoeck *et al.* 1993]:

Diffuse Wolken:
Die Dichte in solchen Wolken ist besonders niedrig. Man findet Teilchendichten von ca. $n \approx 100\,\mathrm{cm}^{-3}$ und die Temperatur beträgt etwa 100 K. Sie sind charakterisiert durch eine geringe visuelle Absorption ($A_v \approx 1\,\mathrm{mag}$) und sie werden deshalb anhand der Absorptionslinien von Molekülen und Atomen im Spektrum heller Hintergrundsterne identifiziert und in ihrer Zusammensetzung erforscht. Die interstellare UV–Strahlung verhindert die Bildung komplexer Moleküle und die Dichte der freien Atome ist somit hoch. Es werden nur wenige Sorten zweiatomiger Moleküle in den diffusen Wolken gefunden. H–Atome sind teilweise zu H_2 umgewandelt. Die diffusen Wolken werden anhand der 21cm–Emissionslinie des neutralen Wasserstoffs identifiziert. Ein Beispiel für eine diffuse Wolke ist ζ Oph.

Dunkelwolken:
Die kalten Dunkelwolken sind am Himmel als schwarze Flecken gut zu erkennen (große optische Tiefe im Visuellen) und zeigen eine komplexe Struktur. Die CO–Emission der Taurus–Dunkelwolke beispielsweise zeigt zahlreiche Wolken mit mittleren Dichten zwischen $n \approx 10^3\,\mathrm{cm}^{-3}$ und $n \approx 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$. Die mittlere Temperatur in diesen Wolken beträgt ca. 10 bis 20 K. Unter diesen Bedingungen können sich komplexe Moleküle bilden, da die interstellare UV–Strahlung durch den Staub abgeschirmt wird und nicht tief in die Wolke eindringen kann. Die H–Atome sind dann fast vollständig zu H_2 umgewandelt. Innerhalb solcher Wolken wurden dichtere Gebiete ($n \approx 10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$ bis $n \approx 10^5\,\mathrm{cm}^{-3}$) mit einer Ausdehnung von der Größenordnung 1 pc beobachtet. Diese Regionen sind als Sternentstehungsgebiete bekannt. Die Dunkelwolken haben einen Durchmesser von mehreren pc. Vielleicht ist unsere Sonne (und die Planeten unseres Sonnensystems) aus solch einer Wolke entstanden.....

Riesen–Molekülwolken:
Diese Wolken haben ebenfalls eine komplexe Struktur. Sie unterscheiden sich aber von den Dunkelwolken durch ihre Größe und manchmal durch ihre Temperatur: Sie können wesentlich wärmer sein. Sie haben einen Durchmesser von etwa 40 bis 100 pc und sind sehr massiv (die Gesamtmasse beträgt ca. $10^5 M_\odot$). In den dichteren Regionen findet man $n \approx 10^8\,\mathrm{cm}^{-3}$ und T=100–200 K. Diese Riesen–Molekülwolken sind ebenfalls Entstehungsgebiete für kleine und massive Sterne. Ein Beispiel ist die Molekülwolke OMC-1, die etwa 500 pc von der Erde entfernt ist.

Zwischenwolken–Medium
Die Molekülwolken und die diffusen Wolken sind in ein „Zwischenwolken–Medium" eingebettet. Dieses Medium ist ein warmes Gas mit Temperaturen der Größenordnung 10^3 K und geringen Dichten ($n \approx 10^{-1}\,\mathrm{cm}^{-3}$). Der Wasserstoff ist teilweise ionisiert und es existieren keine Moleküle.

2.2 Interstellare Moleküle

Die Fortschritte der astronomischen Beobachtungen in den letzten 30 Jahren haben zur Entdeckung einer komplexen und unerwarteten Chemie im interstellaren Medium geführt. Selbst in den dichtesten Molekülwolken bleiben die Dichten so gering (siehe Kap. 2.1) und die Temperaturen so tief, daß die Molekülbildung weit vom thermodynamischen Gleichgewicht entfernt stattfindet. Etwa 80 teils überraschend komplizierte Molekülsorten sind bis jetzt in den interstellaren Wolken entdeckt worden. In Tab. 1 sind die Moleküle zusammengefaßt, die in Dunkelwolken tatsächlich beobachtet worden sind [van Dishoeck *et al.* 1993, Irvine *et al.* 1991].

Tabelle 1: **Interstellare Moleküle**

Anzahl der Atome						
2	3	4	5	6	7	≥8
H_2	H_2O	NH_3	HC_3N	CH_3OH	HC_5N	CH_3CHO
OH	H_2S	H_2CO	C_4H	CH_3CN	CH_3CCH	CH_3C_3N
SO	SO_2	HNCO	CH_2NH	CH_3SH	CH_3NH_2	HC_7N
SiO	HNO	H_2CS	CH_2CO	NH_2CHO	CH_3CHO	CH_3OCH_3
SiS	HCN	HNCS	NH_2CN	CH_3NC	CH_2CHCN	CH_3CH_2OH
NO	HNC	C_3N	HOCHO	HC_2CHO	C_6H	CH_3CH_2CN
NS	C_2H	C_3H	C_3H_2	C_5O		CH_3C_4H
HCl	HCO	C_3S	CH_2CN	C_5H		HC_9N
PN	OCS	C_3O	H_2CCC	H_2CCCC		$HC_{11}N$
NH	C_2S	C_2H_2	CH_4	HC_3OH		CH_3C_5N
CH	C_2O	HC_2N	HCOOH			$(CH_3)_2CO$
CN						$HCOOCH_3$
CO						
CS						
C_2						
SiC						

Wir stellen fest, daß alle beobachteten Moleküle aus den Elementen H, C, N, O, S und Si aufgebaut sind. H_2 ist in allen Fällen das häufigste Molekül. In der diffusen Wolke ζ Oph hat das besonders stabile Molekül CO eine Häufigkeit von ca. 10^{-5} relativ zu Wasserstoff und ist zweifellos das zweithäufigste Molekül. Es wird durch seinen Rotationsübergang von dem ersten angeregten Niveau $J = 1$ in den Grundzustand $J = 0$ bei 2.6 mm beobachtet. Die anderen Moleküle haben Häufigkeiten von 10^{-7} (OH, CH, H_2CO, NH_3, H_2O, HCN) bis 10^{-9} (CS) oder weniger [Wagenblast 1992]. Man beachte außerdem die Vielfalt der „organischen" Moleküle, die aufgrund der Fähigkeit von C, komplizierte Verbindungen zu bilden, entstehen können.

Die „typischen" Molekülwolken haben Temperaturen von 10–100 K, d.h. sie strahlen im Millimeter– (10–1 mm), Submillimeter– (1–0.1 mm) und fernen Infrarot– (100–30 μm) bereich. In diesen Wellenlängenbereichen ist die Absorption durch den interstellaren Staub vernachlässigbar und die Wechselwirkung der Strahlung mit der Rotationsbewegungen der Moleküle ist maximal. Aus diesem Grund wurden die meisten Moleküle anhand ihrer Rotationsspektren entdeckt. Es ist zu beachten, daß nur die Moleküle, die ein permanentes Dipolmoment besitzen, auf diese Weise beobachtet werden können. Dieses rotierende Moment steht in Wechselwirkung mit der einfallenden Strahlung und erlaubt den Energieaustausch zwischen der Strahlung und dem Molekül. Das einfache Molekül O_2 ist z.B. noch nicht entdeckt worden, obwohl es vermutlich nicht selten ist. Homonukleare Moleküle wie z.B. H_2 und N_2 müssen anhand ihrer Absorptionslinien durch Anregung elektronischer Zustände im sichtbaren Bereich vor hellen Hintergrundsternen beobachtet werden.

Die Frage nach dem Ursprung interstellarer Moleküle ist besonders interessant. Es wird generell angenommen, daß die Moleküle sich durch chemische Reaktionen verschiedener Art bilden: Der interstellare Staub, der sich hauptsächlich in den äußeren Hüllen später Sterne bildet (siehe unten), kann aufgrund von Schocks oder Stößen zerstört werden und dabei Moleküle freisetzen. Eine andere Möglichkeit zur Molekülbildung sind die Sternatmosphären, denn sie können günstige Bedingungen zur Molekülbildung bieten, die dann durch einen Sternwind in das interstellare Medium gelangen. Allerdings wird ein Großteil der dort gebildeten Moleküle (hauptsächlich die kleinen Moleküle) durch Dissoziation durch das interstellare UV–Feld wieder zerstört. Die Dunkelwolken bieten zweifellos die besten Bedingungen für die Molekülbildung. Der anwesende Staub verursacht eine visuelle Extinktion von über 1 mag. Die Moleküle erleiden somit im Inneren einer Wolke keine Photodissoziation durch von außen her eindringende UV–Strahlung. Man könnte solche Wolken als „Molekülfabriken" bezeichnen.

2.3 Interstellarer Staub

Die Anwesenheit von Staubteilchen in der interstellaren Materie ist mit bloßem Auge leicht zu erkennen. Ein Blick auf den berühmten „Kohlensack" bei α Cen zeigt, daß das Licht der Hintergrundsterne eine starke Absorption erfährt. Diese Absorption beträgt im visuellen Bereich etwa 1 bis 2 mag kpc^{-1}. Staub ist somit ein wichtiger Bestandteil der interstellaren Materie und spielt eine wesentliche Rolle in der Entwicklung dieser Materie. Die Wichtigkeit des Staubs läßt sich anhand der folgenden Punkte abschätzen [Beck 1993]:

- Etwa 50% der schweren Elemente im Universum befinden sich in Staubkörnern verschiedener Formen und Größen.
- Die Staubteilchen sind die Hauptopazitätsquellen und bestimmen somit das Spektrum der mit Staub umgebenen Objekte.
- Durch chemische Reaktionen an ihrer Oberfläche erlauben sie die Bildung zahlreicher Moleküle (Oberflächenreaktionen).

- Die Staubteilchen und die chemischen Prozesse, die im interstellaren Medium ablaufen, sind dann intim miteinander verbunden. Die Staubteilchen sind bei der Änderung, Erhaltung und dem Transport von Molekülen stark beteiligt.

- Ohne Staubteilchen gäbe es keine Planetenentstehung: Durch Koagulation können sich in protoplanetaren Akkretionsscheiben größere Staubteilchen bilden. Im Laufe der Zeit können dichtere Gebiete entstehen, die durch Gravitation zu Planetoïden und später zu Planeten führen.

Die Hauptinformationen über den Staub erhält man durch Beobachtung der Wechselwirkungen zwischen Staubkörnern und Licht. Der Staub wird durch seine starke, kontinuierliche Extinktion und durch einzelne, starke Emissions– und Absorptionsbänder beobachtet. In Absorption beobachtet man Bänder in optisch dicken Hüllen um entwickelte Sterne oder bei Punktquellen in Molekülwolken (Protosterne). Die Bänder sind auch manchmal in Emission zu beobachten. Emissionsquellen sind Staubhüllen um sehr junge oder sehr späte Sterne. Eine Emission wird auch durch Staub verursacht, der vom Strahlungsfeld der Milchstraße aufgeheizt wird. Die Absorption erfolgt in diesem Fall im UV– und die Emission im Infrarotbereich.

Die wichtigsten Staubsorten in Molekülwolken sind kohlenstoffhaltige Teilchen, Silikatteilchen ($[Mg,Fe]SiO_3$ und $[Mg,Fe]_2SiO_4$) und Troilit (FeS). Staubsorten wie MgO, FeO, $Mg_xFe_{1-x}O$ könnten zusätzlich in den Hüllen später M–Sterne anwesend sein.

- Silikatteilchen:
  Wenn eine IR-Quelle in eine dichte Wolke eingebettet ist, beobachtet man charakteristische Absorptionsbänder, die den verschiedenen Schwingungsmoden von Molekülgruppen zugeschrieben werden. Die Silikatbänder erscheinen in optisch dünnen, zirkumstellaren Staubhüllen um entwickelte Sterne (M–Sterne, d.h. sauerstoffreiche Sterne) aber auch in Staubscheiben um T–Tauri–Sterne. Im Falle der Silikatteilchen beobachtet man hauptsächlich zwei Absorptionsbänder bei $\lambda = 9.7\,\mu$m und $18\,\mu$m. Es wird vermutet [Woolf & Ney 1969], daß diese Bänder durch Schwingungen des SiO_4–Tetraeders hervorgerufen werden (Schwingung der Si–O– Bindung und des Si–O–Si–Valenzwinkels). Die verschiedenen Beobachtungen der Silikatteilchen haben gezeigt, daß deren Struktur amorph ist. Manche Experimente führten aber zu dem Schluß, daß diese amorphe Struktur durch Ausheizen in eine kristalline Struktur umgewandelt wird, sobald ausreichend hohe Temperaturen (ca. 1100 K) erreicht sind [Nuth & Donn 1982]. Ein gelegentlich beobachtetes Absorptionsband bei $\lambda = 11.2\,\mu$m läßt in einigen Objekten vermuten, daß dort Silikatteilchen mit kristalliner Struktur existieren [Aitken *et al.* 1988].

- Troilit:
  Während der Entstehung unseres Sonnensystems war der anwesende Schwefel S im Troilit FeS gebunden. Diese Vermutungen beruhen auf Analysen der Koma des Halley–Kometen, bei dem eine Korrelation zwischen Fe und S zu existieren scheint. Troilit ist wahrscheinlich das wesentliche schwefelhaltige Kondensat im interstellaren Medium. Leider hat Troilit keine charakteristischen Absorptionsbänder, sodaß ein direkter Nachweis seiner Anwesenheit unmöglich ist.

- Eisen:
  Fe ist im wesentlichen im Olivin gebunden und könnte daneben auch als Troilit oder Magnetit (Fe_3O_4) anwesend sein. Andere Fe–haltige Hochtemperaturkondensate in Verbindung mit Si oder O können sich in zirkumstellaren Hüllen bilden.

- Kohlenstoff:
  Im UV–Bereich beobachten wir ein breites, interstellares Absorptionsband bei $\lambda = 2175$ Å. Dieses Band wird wahrscheinlich von kleinen Kohlenstoffteilchen (<100 Å) verursacht. Nur 10% des gesamten Kohlenstoffs ist nötig, um dieses Absorptionsband zu erzeugen. Neue Ergebnisse von Colangeli *et al.* (1995) zeigen starke Absorptionsbänder für drei Sorten von kohlenstoffhaltigen Substanzen: amorpher Kohlenstoff in einer Ar–Atmosphäre, amorpher Kohlenstoff in einer H_2–Atmosphäre und Benzen (C_6H_6). Ein deutliches Absorptionsband existiert für alle drei Proben bei 80 – 95 nm. Nur die zwei ersten zeigen allerdings ein Band bei etwa 242 nm. Nach Colangeli *et al.* (1995) sind bestimmte elektronische Übergänge für diese Absorptionsbänder verantwortlich. Keine Absorption ist dagegen bei 2175 Å zu beobachten. Wenn Kohlenstoff überhaupt die Ursache dieser Absorption ist, müssen die übrigen C–Atome als organische Moleküle anwesend sein. Die sog. *PAH* (*polycyclic aromatic hydrocarbons* – kleine, zweidimensionale, ringförmige Strukturen) könnten die Emissionslinien erklären, die in vielen interstellaren und zirkumstellaren Quellen zu beobachten sind. Die Ergebnisse von Léger & Puget (1984) zeigen eine erstaunlich gute Korrellation zwischen den unerklärten Emissionslinien bei 3.3, 6.2, 7.7, 8.6 und 11.3 μm und den Emissionslinien von $C_{24}H_{12}$. Moleküle dieses Typs sind wahrscheinlich häufig. Außerdem wurde ein Emissionsband bei λ=7.7μm in WC–Sternen[1] beobachtet, das dem Emissionsband der C–C–Bindung in PAH ähnlich ist [Cohen *et al.* 1989].

- H_2O–Eis:
  Infrarotspektren von Molekülwolken zeigen eine starkes Absorptionsband bei $\lambda = 3.1\,\mu$m, das der Schwingungsmode der O–H–Bindung zugeschrieben wird.

- andere Eissorten:
  Andere Eissorten sind entdeckt worden, wie CO– ($\lambda = 4.8\,\mu$m), NH_3– ($\lambda = 3.1\,\mu$m) und CH_3OH– ($\lambda = 6.8\,\mu$m) Eis, aber sie haben entweder eine geringe Häufigkeit oder sie spielen keine große Rolle bei der IR–Absorption. CH_3OH ist das zweithäufigste Molekül in vielen interstellaren Eisteilchen [Sandford & Allamandola 1988].

2.4 Woher kommt der Staub?

Im Universum tragen viele Objekte zur Stauberzeugung gemeinsam bei. Staub bildet sich durch Kondensation in den kühlen, äußeren Atmosphären von späten Sternen (roten Riesen), in den expandierenden Hüllen von Novæ und Supernovæ und in Molekülwolken. Man kann den kosmischen Staub in vier verschiedene Populationen teilen [Dorschner & Henning 1995]:

1. Sternstaub

2. Staub im diffusen interstellaren Medium

3. Staub in Molekülwolken

4. Staub in zirkumstellaren Scheiben

[1] WC–Sterne sind Wolf–Rayet–Sterne mit starken Kohlenstoff– und Sauerstofflinien (C II…C IV und O II…O IV).

2.4.1 Sternstaub

Sterne verlieren im Laufe ihres Lebens Materie und dieser Sternwind ist ein wichtiges Staubentstehungsgebiet. Staub bildet sich hauptsächlich außerhalb der Chromosphäre, in einem Bereich, in dem die Temperaturen zwischen 500 K und 1000 K liegen. Für α Ori entspricht diese Temperatur einem Abstand von etwa $2R_*$, wobei R_* der Sternradius ist. In diesem Temperaturbereich bilden die staubbildenden Substanzen eine feste Phase.

Wichtig für die Art des gebildeten Staubs ist das Verhältnis [C]/[O] in der äußeren Hülle des Sterns. Wenn [C]/[O]<1 dann erwarten wir, daß der ganze Kohlenstoff im Molekül CO gebunden ist. Die Bindungsenergie von CO ist nämlich im Vergleich zu anderen Atom–Atom–Bindungen außerordentlich hoch (11.06 eV). M–Sterne mit [C]/[O]<1 erzeugen Silikatstaub, z.B. Olivin (Mg_2SiO_4) mit den charakteristischen Absorptionslinien bei $\lambda = 9.7\,\mu$m und $18\,\mu$m. Silikate wie Fe_2SiO_4 und Oxide wie Fe_3O_4 könnten ebenfalls gebildet werden.

Die sog. C–Sterne mit [C]/[O]>1 haben einen Sauerstoffdefizit und deshalb wird bei diesen eine Bildung von Kohlenstoffteilchen erwartet. Leider gibt es keinen spektralen Beweis für die Existenz von C–Staub in diesen Hüllen, da Kohlenstoffstaub im IR keine charakteristischen Bänder besitzt. Die C–Atome können in diesen Sternen auch organische Moleküle bilden, die z.T. auch beobachtet werden können. Eine kleine Menge von SiC–Staub wird ebenfalls gebildet.

Die obige Regel (Silikatstaub entsteht in M–Sternen und Kohlenstoffstaub in C–Sternen) hat aber Ausnahmen. Manche C–Sterne zeigen Silikatemissionslinien [Kwok & Chan 1993] und die SiC–Emissionslinie ($11.3\,\mu$m) wurde in einigen M–Sternen beobachtet [Skinner *et al.* 1990]. Das SiC–Band wird normalerweise nur in C–Sternen erwartet, in denen C– und Si–Atome in der äußeren Hülle des Sterns zum SiC–Staub kondensieren können.

Diese Sterne erzeugen insgesamt 90% des vorhandenen Staubs im interstellaren Medium. Etwa 8% des gesamten Staubs wird in den expandieren Hüllen von Novæ und Supernovæ gebildet [Beck 1993]. Diese Rate ist aber unsicher, da die Staubbildung in der Nähe von Novæ und Supernovæ ein bisher nur schlecht verstandener Prozeß ist.

2.4.2 Staub im diffusen interstellaren Medium

Die physikalischen Bedingungen, die im diffusen interstellaren Medium herrschen, sind für flüchtige Spezies, wie z.B. Eis oder Moleküle, ungünstig (die Eigenschaften des diffusen interstellaren Mediums haben wir schon zusammengefaßt). Eis kann unter den dort vorherrschenden extrem geringen Drucken nicht existieren und es ist sehr wahrscheinlich, daß die UV–Strahlung die entsprechenden Moleküle in der Gasphase dissoziieren würde. Deshalb ist zu erwarten, daß nur kohlenstoff– oder sauerstoffhaltige Teilchen (Silikat) und vielleicht andere Staubteilchen anwesend sind. Inhomogene Staubteilchen sind wahrscheinlich eine Mischung aus Silikat, Kohlenstoff und kohlenstoffhaltigen Molekülen, Eisen und Vakuum (poröse Teilchen).

Die Größe der Teilchen ist ein wichtiger Parameter. Zu ihrer Feststellung muß man zuerst eine „interstellare“ Staubzusammensetzung annehmen, deren optische Konstanten bekannt sind. Der Extinktionswirkungsquerschnitt ist proportional zu $a^2 n(a) Q_{ext}$, wobei $n(a)$ die gesuchte Radiusverteilung der Teilchen und a der Radius ist. Q_{ext} beschreibt die Effizienz der Teilchen bei der Extinktion von Licht (Absorption + Streuung) und kann bestimmt werden, wenn die optischen Konstanten bekannt sind. In der Praxis wird die Funktion $n(a)$ so berechnet, daß die Ergebnisse mit dem beobachteten Extinktionswirkungsquerschnitt gut übereinstimmen. Die allgemein angenommene Radiusverteilung ist die von Mathis *et al.* (1977). Sie haben gefunden, daß

$$n(a) \sim a^{-3.5} \tag{1}$$

eine gute Darstellung der Extinktionskurve liefert. Die kleinsten (bzw. größten) Teilchen dieser Verteilung haben einen Radius von $0.005\,\mu$m (bzw. $0.25\,\mu$m). Andere Verteilungen sind ebenfalls vorgeschlagen worden.

Aufgrund der harten Bedingungen, die im diffusen interstellaren Medium herrschen, erleiden die Staubteilchen verschiedene Prozesse, die ihre Struktur und ihre Größe beeinflußen. Die wichtigsten sind Staub–Staub–Stöße, Erosion durch Atome oder Moleküle in der Gasphase, Oberflächenreaktionen, Absorption von Strahlung (UV–Strahlung), Verdampfung und Wachstum.

2.4.3 Staub in Molekülwolken

Die Beobachtung von kondensierten Phasen in Molekülwolken ließ vermuten, daß diese Wolken wichtige Staubquellen sind, obwohl der eigentliche Staub (Silikat und Kohlenstoff) von späten Sternen, Novæ oder Supernovæ kommt. Der Staub in Molekülwolken unterscheidet sich von dem Staub im interstellaren Medium durch seine Größenverteilung und die Anwesenheit von Eismänteln auf den Staubteilchen. Koagulationsprozesse aufgrund von Stößen zwischen den Teilchen führen zu größeren Staubkörnern als im interstellaren Medium. Die Größenverteilung kann somit anders sein, als die übliche Verteilung von Mathis *et al.* (1977). In der Regel verursachen die Akkretionsprozesse von Eisteilchen und die Koagulation ein rasches Wachstum der kleinsten Staubteilchen, während die größeren kaum etwas davon spüren. Wie schon erwähnt, werden die verschiedenen Eissorten durch ihre Infrarotbänder beobachtet, die als Absorptionsbänder in den Spektren von Hintergrundsternen oder Protosternen erscheinen, die in die Molekülwolken eingebettet sind. Die anwesenden Eissorten haben wir schon aufgelistet.

2.4.4 Zirkumstellare Scheiben

β Pic ist ein schwacher Hauptreihenzwergstern (mag 4), welcher 6 pc von der Erde entfernt ist. 1983 haben IRAS Beobachtungen zu dem Schluß geführt, daß dieser Stern von einer zirkumstellaren Staubscheibe umgeben ist. Diese Scheibe hat einen Durchmesser von 400 AE und besteht aus Staubteilchen, die in derselben Ebene den Zentralkörper umkreisen. Diese Scheibenstruktur hat die Wissenschaftler auf den Gedanken gebracht, daß wir eine *protoplanetare Scheibe* vor uns haben könnten [Smith & Terrile 1984]. Außerdem liegt die Masse der Scheibe ($M \approx 10^{-7} M_\odot$) in der Größenordnung der Masse unseres Planetensystems. IRAS hat damals mehrere Sterne mit einer Staubscheibe entdeckt, aber β Pic ist bis jetzt der einzige Stern, dessen Staubscheibe im sichtbaren Bereich zu sehen ist. Andere bekannte Sterne mit einer Staubscheibe sind z.B. α Lyr (Wega), α PsA (Fomalhaut) oder ϵ Eri.

Wir erwarten, daß die Temperatur in der Scheibe mit *zunehmendem* Abstand vom Protostern *abnimmt*. In der Nähe der Sternoberfläche sollte eine Temperatur von mehreren Tausend K herrschen. Zwischen 0.1 und 1 AE hat man $T \approx 1000$ K. Bei Radien, bei denen terrestrische Planeten entstehen können (1 bis 2 AE), hat man eine Temperatur von einigen Hundert K. Die Scheibe strahlt hier im IR–Bereich, zwischen 5 und 20 μm. Bei größeren Abständen, in denen sich in unserem Sonnensystem die Gasplaneten befinden, ist die Scheibe ziemlich kalt und strahlt im Ferninfrarot– und Submillimeterbereich. Die zirkumstellaren Scheiben wurden auf folgende Weise identifiziert: Die Objekte haben einen IR–Strahlungsüberschuß, der mit den theoretischen Atmosphärenmodellen nicht übereinstimmt. Die Identifizierung dieses Infrarotüberschusses ist oft die günstigste Methode, um die Existenz einer Scheibe nachzuweisen.

Es wird vermutet, daß wenigstens die Hälfte der jungen T–Tauri–Sterne eine zirkumstellare Scheibe besitzen. Diese Scheiben scheinen ziemlich massiv zu sein ($0.001 M_\odot$ bis $1 M_\odot$ – im Durchschnitt $0.03 M_\odot$). Sie sind auf jeden Fall massiv genug, um in einer späteren Phase die Bildung eines Sonnensystems zu erlauben. T–Tauri–Sterne gehören zu den *Young Stellar Objects* („YSOs"). Es handelt sich dabei um sehr junge Sterne (höchstens 10^7 Jahre alt), die sich oberhalb der Hauptsequenz befinden (ihre Helligkeit ist ziemlich hoch). Sie werden deswegen manchmal als *pre–main sequence objects* (PMS–Objekte) bezeichnet. Sie gehören zu den späteren Spektraltypen (G–...M–Sterne) und werden manchmal in Verbindung mit der umgebenden Materie beobachtet. T–Tauri–Sterne befinden sich in einer unruhigen, aktiven Phase und sind deswegen variable Sterne (ihre Helligkeit kann um ca. 1 mag innerhalb von einigen Tagen variieren). Sie haben in der Regel mittlere Massen (einige $M_\odot$) und mittlere Temperaturen (6000 K). In diesem Fall haben wir es mit protostellaren Scheiben zu tun, d.h. frühen protoplanetaren Scheiben. Wenn die YSOs noch zu sehr in Molekülwolken eingebettet sind, sind sie im UV und im visuellen Bereich unsichtbar und werden durch ihr IR-Spektrum charakterisiert. Die zirkumstellaren Scheiben haben Durchmesser von ein paar AE bis zu mehreren 100 AE. Die Infrarotquelle L1551 IRS 5 scheint einen Durchmesser von ca. 700 AE zu haben [Sargent *et al.* 1988] und HL Tau sogar 2000 AE [Sargent & Beckwith 1987].

Die YSOs sind nicht nur von zirkumstellaren Scheiben umgeben, sondern auch von massiven sphärischen Hüllen ($M \approx 0.01 M_\odot$). Im Gegensatz dazu sind um Hauptsequenzsterne wie β Pic oder α Lyr keine massiven Scheiben oder Hüllen bekannt und es werden auch in diesen Scheiben oder Hüllen keine kleinen Staubteilchen ($\leq$1 mm) beobachtet. Diese Scheiben verlieren wahrscheinlich im Laufe der Zeit ihre kleinsten Teilchen und vielleicht auch das Gas. Diese Prozesse können die Planetenbildung verhindern. Sie werden dabei immer durchsichtiger, erst im Infrarot– und dann im visuellen Bereich.

3 Theorie der Akkretionsscheiben

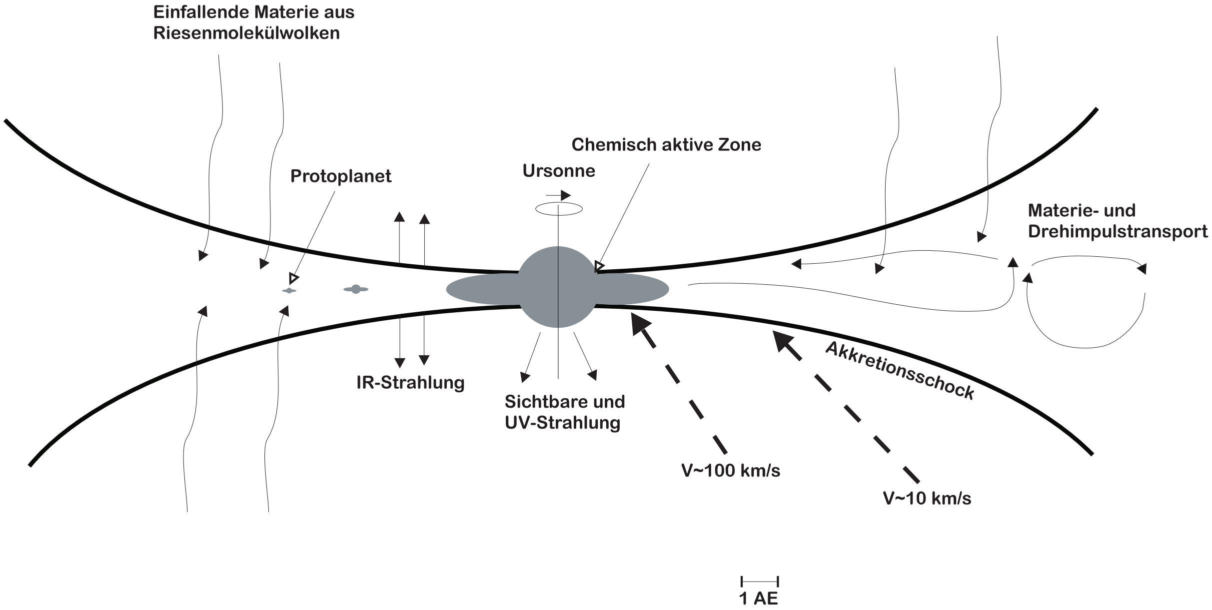

Abbildung 1: *Schematische Darstellung einer protoplanetaren Akkretionsscheibe (Quellen: van Dishoeck et al. (1993) und Neufeld & Hollenbach (1994)).*

Die schematische Darstellung einer protoplanetaren Akkretionsscheibe (Abb. 1) zeigt die Komplexität der verschiedenen Prozesse, die in solchen Objekten ablaufen.

Die Materie bewegt sich eigentlich nicht radial nach innen, wie das Modell es vermuten läßt. Komplizierte Bewegungen erzeugen einen ständigen Materie– und Drehimpulstransport durch die Scheibe. Es gibt sehr komplexe Wechselwirkungen in der Scheibe, z.B. zwischen der Scheibenmaterie und den Protoplaneten, oder am Innenrand, wo die Scheibe in den Protostern übergeht. Außerdem existieren auch Wechselwirkungen zwischen der Scheibe und dem äußeren Medium (der umgebenden Molekülwolke), in dem die Scheibe sich befindet: Wie in Abb. 1 angedeutet ist, „fällt“ ständig Materie (Gas und Staub) mit teils großen Einsturzgeschwindigkeiten in die Scheibe hinein. An der Ober– und Unterseite der Scheibe existieren aus diesem Grund *Akkretionsstoßfronten* (Schocks), die die Zusammensetzung der einfallenden Materie stark verändern können (Kap. 6.9).

Wir wollen in diesem Kapitel die drei Grundgleichungen für die hydrodynamische Beschreibung der Akkretionsscheibe erläutern. Dies sind die Kontinuitätsgleichung, die Drehimpulserhaltungsgleichung und die Energiegleichung. Dazu kommt die Zustandsgleichung des Gases. Die komplette Theorie der Akkretionsscheiben findet man in dem Standardwerk von Frank *et al.* (1992).

Um die Akkretionsscheibe zu beschreiben, verwenden wir ein zylindrisches Koordinatensystem (s, ϕ, z) mit dem Zentrum im Zentrum des Protosterns. Die Symmetrieachse fällt mit der Richtung des gesamten Drehimpulses zusammen. s ist der radiale Abstand, ϕ der Polarwinkel und z die vertikale Höhe. Wir nehmen an, daß die Scheibe axialsymmetrisch ist, so daß $\frac{\partial}{\partial \phi} \equiv 0$ gilt. Außerdem soll die Scheibe dünn sein, d.h. die Höhe H ist überall viel kleiner als der radiale Abstand s.

3.1 Die Kontinuitätsgleichung

Wir definieren zuerst die Flächendichte $\Sigma(s,t)$ der Scheibe

$$\Sigma(s,t) \equiv \int_{-H}^{+H} \rho(s,z,t)dz\,. \tag{2}$$

Im Rahmen der 1–Zonen–Näherung in der vertikalen Richtung kann die Dichte ρ als z-unabhängige Größe angesehen werden. Außerdem können alle Ableitungen $\frac{\partial}{\partial z}$ durch $\frac{1}{H}$ approximiert werden. Wir haben dann für die oben definierte Flächendichte

$$\Sigma(s,t) = 2H\rho\,. \tag{3}$$

Wir definieren die radiale Geschwindigkeit des Gases v_s in Richtung zum Zentrum. Die Masse eines Materieringes mit dem inneren Radius s und einer radialen Ausdehnung Δs ist $2\pi s\Delta s\Sigma$ und die zeitliche Änderung dieser Masse ist dann

$$\frac{\partial}{\partial t}(2\pi s\Delta s\Sigma) = 2\pi s\Sigma(s,t)v_s(s,t) - 2\pi(s+\Delta s)\Sigma(s+\Delta s,t)v_s(s+\Delta s,t)\,. \tag{4}$$

Für kleine Δs hat man dann

$$s\frac{\partial\Sigma}{\partial t} + \frac{\partial s\Sigma v_s}{\partial s} = 0\,. \tag{5}$$

Für eine stationäre Scheibe sind alle Ableitungen nach der Zeit null, so daß

$$2\pi s\Sigma v_s = const \tag{6}$$

gilt. Da diese Gleichung die Massenerhaltung beschreibt, ist $2\pi s\Sigma v_s$ die konstante Massenflußrate $\dot{M}$ durch jeden Punkt der Scheibe. Dann gilt

$$2\pi s\Sigma(-v_s) = \dot{M}\,. \tag{7}$$

Da v_s bei Akkretion nur negative Werte annehmen kann, ist durch die Wahl des negativen Vorzeichens gewährleistet, daß bei Akkretion die Zentralmasse zunimmt. Die Kontinuitätsgleichung in dieser Form ist unsere erste Grundgleichung.

3.2 Die Drehimpulserhaltung

Ein Ring der Breite Δs hat eine Gesamtmasse $2\pi s\Delta s\Sigma$ und somit einen Gesamtdrehimpuls $2\pi s\Delta s\Sigma s^2\Omega$, wobei Ω die Winkelgeschwindigkeit der Materie im Abstand s ist. Die Drehimpulserhaltung lautet in diesem Fall

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}(2\pi s\Delta s\Sigma s^2\Omega) \;&=\; 2\pi s\Sigma(s,t)s^2\Omega(s)v_s(s,t)\\ &\quad -2\pi(s+\Delta s)\Sigma(s+\Delta s,t)(s+\Delta s)^2\Omega(s+\Delta s)v_s(s+\Delta s,t)\\ &\quad +\frac{\partial G}{\partial s}\Delta s\,,\end{aligned} \tag{8}$$

wobei $G(s,t) = 2\pi s\nu\Sigma s^2(d\Omega/ds)$ das Drehmoment ist, das auf den Ring aufgrund der differentiellen Rotation wirkt [Frank *et al.* 1992]. ν ist die kinematische Viskosität. Der Gesamtdrehimpuls wird zusätzlich durch die Materie, die aus der umgebenden Wolke in die Scheibe hineinfällt, modifiziert. Wir nehmen an, daß die Gesamtmasse dieser Materie vernachlässigbar klein ist, sodaß der Gesamtdrehimpuls in der Scheibe erhalten bleibt. Wenn in (8) $\Delta s \to 0$ geht, haben wir

$$s\frac{\partial}{\partial t}(\Sigma s^2\Omega) + \frac{\partial}{\partial s}(s\Sigma v_s s^2\Omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{\partial G}{\partial s}\,. \tag{9}$$

Im stationären Fall können wir die Drehimpulsgleichung integrieren. Wir erhalten

$$s\Sigma v_s s^2\Omega = \frac{G}{2\pi} + \frac{C}{2\pi}\,, \tag{10}$$

wobei C eine Konstante ist.

Mit dem angegebenen Ausdruck für G erhalten wir

$$-\nu\Sigma\frac{d\Omega}{ds} = -\Sigma v_s\Omega + \frac{C}{2\pi s^3}\,. \tag{11}$$

Wir nehmen an, daß wir an einem beliebigen Radius s_* $(s_0 \le s_* \le s_i)$ $\Omega'(s_*) = 0$ haben [Duschl & Tscharnuter 1991]. s_0 ist hier der Radius des zentralen Protosterns und s_i der innerste Radius, an dem sich die Gasmassen mit einer Keplerschen Winkelgeschwindigkeit bewegen (der Bereich $[s_*,s_i]$ ist somit die Grenzschicht zwischen dem Protostern und der Akkretionsscheibe). Sei Ω_0 die Winkelgeschwindigkeit bei s_0. Mit $\Omega_0 = \varphi_0\Omega(s_i)$, $s_0 = s_*(1+r_0)$ und $s_i = s_*(1+r_i)$ können wir die Konstante C bestimmen:

$$C = -\dot{M}\varphi_0(GMs_*)^{\frac{1}{2}}\frac{(1+r_0)^2}{(1+r_i)^{\frac{3}{2}}}\,. \tag{12}$$

Wir erhalten somit die Drehimpulsgleichung in ihrer endgültigen Form

$$\nu\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi}\Big[1 - \zeta(\frac{s_*}{s})^{1/2}\Big]\,, \tag{13}$$

wobei $\zeta = \varphi_0\frac{(1+r_0)^2}{(1+r_i)^{\frac{3}{2}}}$.

Wenn die Grenzschicht keine radiale Ausdehnung hat, d.h. wenn $r_i \to 0$ und $\varphi_0 \to 1$, dann haben wir $\zeta \to 1$ und wir erhalten die übliche Gleichung [Pringle 1981].

3.3 Die Energiegleichung

Das Ziel dieses Abschnittes ist die Herleitung eines Ausdruckes für den Temperaturverlauf in der Zentralebene der Scheibe. Wir betrachten einen Gasring der Breite Δs, also zwischen s und $s+\Delta s$. Das Nettodrehmoment, das auf diesen Ring wirkt, ist

$$G(s+\Delta s) - G(s) = \frac{\partial G}{\partial s}\Delta s\,. \tag{14}$$

Dieses Moment wirkt in der Drehrichtung $\Omega(s)$. Die Leistung dieses Drehmoments ist

$$\Omega\frac{\partial G}{\partial s}ds = \Big[\frac{\partial}{\partial s}(G\Omega) - G\Omega'\Big]ds\,. \tag{15}$$

Die Integration von $\frac{\partial}{\partial s}(G\Omega)$ liefert einen Term, der nur von den Randbedingungen abhängt: $[Gs]^{außen}_{innen}$. Dieser Term stellt die Rotationsenergie dar, die durch die Scheibe transportiert wird. Der zweite Term ist ein lokaler Verlust mechanischer Energie. Er beschreibt die Energiedissipation im Gas mit der Rate $G\Omega'$ per Ringbreite ds. Sei $D(s)$ die Dissipationsrate pro Flächeneinheit. Wir haben dann, da der Ring zwei Oberflächen hat,

$$D(s) = \frac{G\Omega'}{4\pi s} = \frac{1}{2}\nu\Sigma(s\Omega')^2 \,. \tag{16}$$

Wir können hier die Keplersche Rotationsgeschwindigkeit $\Omega = \Omega_K = \left(\frac{GM}{s^3}\right)^{\frac{1}{2}}$ einsetzen und mit der Drehimpulsgleichung erhalten wir den folgenden Ausdruck für die in der Scheibe dissipierte mechanische Energie $D(s)$

$$D(s) = \frac{3GM\dot{M}}{8\pi s^3}\left[1 - \zeta(\frac{s_*}{s})^{1/2}\right] . \tag{17}$$

Diese Energie muß von der Oberfläche der Scheibe abgestrahlt werden. Damit dies möglich ist, muß durch Transportprozesse die Energie aus dem Scheibeninneren zur Oberfläche transportiert werden. Wenn wir annehmen, daß der vertikale Energietransport *nur* radiativ erfolgt, haben wir für den Strahlungsfluß $F(z)$ in der Eddington–Näherung

$$F(z) = -\frac{16\sigma T^3}{3\kappa_R\rho}\frac{\partial T}{\partial z} \,, \tag{18}$$

wobei κ_R das Rosseland–Mittel der Opazität (siehe Kap. 5.1) und σ die Stefan–Boltzmann-Konstante ist. Hier wurde angenommen, daß die optische Tiefe groß ist, d.h., daß die Strahlungsintensität nahezu gleich der Schwarzkörperstrahlung ist.

Sei Q^+ die in der mittleren Ebene dissipierte Energie pro Volumeneinheit. Wir haben

$$\frac{\partial F}{\partial z} = Q^+ \,. \tag{19}$$

Die Integration liefert

$$F(H) - F(0) = \int_0^H Q^+(z)dz = D(s) \,. \tag{20}$$

Im Rahmen der 1–Zonen–Näherung haben wir

$$T^3\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{4}\frac{\partial T^4}{\partial z} \approx \frac{1}{4}\frac{T^4}{H} \,, \tag{21}$$

d.h.

$$F(z) \approx -\frac{4\sigma}{3\kappa_R\rho}\frac{T^4(z)}{H} \,. \tag{22}$$

Wenn wir annehmen, daß die Zentraltemperatur T_c viel größer als die Oberflächentemperatur $T(H)$ ist, haben wir

$$\frac{4\sigma}{3\kappa_R\rho}\frac{{T_c}^4}{H} = D(s) \,. \tag{23}$$

Die optische Tiefe τ des Gases ist im Rahmen unserer Näherung

$$\tau = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_R = \rho H \kappa_R \tag{24}$$

und wir erhalten mit (17) die endgültige Energiegleichung

$$\frac{4\sigma}{3\tau}{T_c}^4 = \frac{3GM\dot{M}}{8\pi s^3}\left[1 - \zeta(\frac{s_*}{s})^{1/2}\right] . \tag{25}$$

Im Grenzfall einer sehr dünnen Grenzschicht hat man $\zeta = 1$.

3.4 Die Viskosität

Der Drehimpulstransport von innen nach außen erfolgt in einer Akkretionsscheibe durch viskose Reibung. Die übliche Molekularviskosität reicht dazu aber nicht aus. Man kann zeigen, daß diese Viskosität viel zu klein ist, um einen Akkretionsprozeß zu erlauben. Die Zeitskala eines solchen Prozesses würde in diesem Fall die Hubble–Zeit übersteigen! Als Ausweg wurde von Shakura & Sunyaev (1973) eine turbulente Viskosität als Ursache der Reibung vorgeschlagen.

Die Reynolds–Zahl erreicht in einer Akkretionsscheibe sehr hohe Werte [Frank *et al.* 1992]. Aus Laborexperimenten ist bekannt, daß eine Strömung turbulent wird, wenn ein kritischer Reynolds–Zahl–Wert überstiegen wird. Die Wechselwirkung der Turbulenzelemente führt dann zu einer „turbulenten“ Viskosität von der Größenordnung

$$\nu_{turb} = \lambda_{turb} \cdot v_{turb}\,, \tag{26}$$

wobei λ_{turb} die Größenordnung der Turbulenzlänge und v_{turb} die Turbulenzgeschwindigkeit ist (die effektive kinematische Viskosität eines turbulenten Prozesses wird üblicherweise $\nu \sim l \cdot v$ geschrieben, wobei l die Größe der größten Turbulenzzelle und v eine charakteristische Gasgeschwindigkeit in dieser Zelle ist).

Für λ_{turb} und v_{turb} können wir obere Grenzen einführen. λ_{turb} kann nicht größer sein, als die Dicke der Scheibe, so daß wir $\lambda_{turb} \leq H$ haben. Als obere Grenze für v_{turb} nehmen wir die lokale Schallgeschwindigkeit $c_s = \sqrt{\frac{P}{\rho}}$: $v_{turb} \leq c_s$. Da die Turbulenzlänge und die Turbulenzgeschwindigkeit momentan nicht aus einer physikalischen Theorie bestimmt werden können, machten Shakura & Sunyaev (1973) den sog. α–Ansatz

$$\nu = \alpha c_s H\,. \tag{27}$$

Die ganze noch nicht bekannte Physik der turbulenten Viskosität steckt in dem Parameter α. Wir erwarten $\alpha \leq 1$.

3.5 Die Zustandsgleichung

Bei der geringen Dichte in der Akkretionsscheibe ist die Zustandsgleichung der Materie die ideale Gasgleichung

$$P = nkT_c\,. \tag{28}$$

P ist der Druck, n ist die Anzahl der Teilchen pro cm^3 und k ist die Boltzmann–Konstante.

Wegen $\rho = \Sigma/2H$ haben wir

$$P = \frac{\Sigma \mathcal{R} T_c}{2H\mu}\,. \tag{29}$$

$\mathcal{R}$ ist die Gaskonstante und μ ist das mittlere Molekulargewicht. Da die Helium-Häufigkeit in der interstellaren Materie etwa 0.1 beträgt (relativ zur Gesamtzahl der Wasserstoffatome) und weil der Wasserstoff bei den niedrigen Temperaturen im größten Teil einer *protoplanetaren* Akkretionsscheibe praktisch vollständig zu H_2 assoziiert ist, haben wir

$$\mu = \frac{2n_{\mathrm{H}_2} + n_{\mathrm{H}} + 4n_{\mathrm{He}}}{n_{\mathrm{H}_2} + n_{\mathrm{H}} + n_{\mathrm{He}}} \approx \frac{2n_{\mathrm{H}_2} + 0.4(2n_{\mathrm{H}_2})}{n_{\mathrm{H}_2} + 0.1(2n_{\mathrm{H}_2})} = \frac{7}{3}\,.$$

3.6 Hydrostatisches Gleichgewicht

In der vertikalen Richtung nimmt man hydrostatisches Gleichgewicht an, d.h. der Druckgradient in z–Richtung ist gleich den gravitativen Kräften in dieser Richtung:

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\rho g_z \approx -\rho g \frac{z}{s} \,. \tag{30}$$

Wir haben dann näherungsweise

$$\frac{\partial P}{\partial z} \approx \frac{P}{H} = \rho \frac{GM}{s^3} H \,. \tag{31}$$

G ist hier die Gravitationskonstante. Mit $c_s = \sqrt{P/\rho}$ erhalten wir

$$H = \frac{c_s}{\Omega} \,. \tag{32}$$

c_s ist die lokale Schallgeschwindigkeit. Da $H \ll s$ vorausgesetzt wird, haben wir $c_s \ll v_\phi$. In einer dünnen Scheibe rotieren dann die Gasmassen immer mit Überschallgeschwindigkeit.

3.7 Struktur zeitunabhängiger α–Akkretionsscheiben

Anhand der in den obigen Abschnitten hergeleiteten Grundgleichungen wollen wir die lokale Struktur einer klassischen α–Akkretionsscheibe bestimmen, d.h. wir wollen die radiale Abhängigkeit von T_c, P, H und Σ bestimmen. Die detaillierte Rechnung ist relativ lang und befindet sich deshalb im Anhang B. Wir erhalten die folgenden Ausdrücke:

$$T_c = 229\, s^{-\frac{9}{10}} \left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{\frac{1}{5}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{3}{10}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{2}{5}} \kappa_R{}^{\frac{1}{5}} \quad [\mathrm{K}] \tag{33}$$

$$P = 0.095\, s^{-\frac{51}{20}} \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{\alpha\mu^4}\right)^{-\frac{1}{10}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{17}{20}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{4}{5}} \kappa_R{}^{-\frac{1}{10}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm\,s^2}}\right] \tag{34}$$

$$H = 6.939 \cdot 10^{11}\, s^{\frac{21}{20}} \left(\frac{1}{\alpha\mu^4}\right)^{\frac{1}{10}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{7}{20}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{5}} \kappa_R{}^{\frac{1}{10}} \quad [\mathrm{cm}] \tag{35}$$

$$\Sigma = 7.004\, s^{-\frac{3}{5}} \left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{\frac{4}{5}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{5}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{3}{5}} \kappa_R{}^{-\frac{1}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm^2}}\right] \tag{36}$$

Der radiale Abstand s ist in diesen Gleichungen in AE ausgedrückt und $\dot{M}_{-7}$ ist die Akkretionsrate in Einheiten von $10^{-7} M_\odot$/Jahr. Die anderen Terme haben ihre übliche Bedeutung. Die radiale Geschwindigkeit v_s kann aus der Kontinuitätsgleichung (7) bestimmt werden:

$$v_s = 9633\, s^{-\frac{2}{5}} \left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{-\frac{4}{5}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{1}{5}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{2}{5}} \kappa_R{}^{\frac{1}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right] . \tag{37}$$

In diesen Gleichungen wurde die radiale Ausdehnung der Grenzschicht am Stern gleich null gesetzt (siehe Kap. 3.2).

Wir sehen, daß die α–Abhängigkeit nicht kritisch ist, d.h. alle physikalischen Größen hängen nicht sehr stark von dem genauen Wert von α ab. Dies gilt allerdings nicht für den Druck P.

Wir können typische Werte am Ort der Erde (s=1) abschätzen:

- Wenn die Materie nur aus H_2 und He besteht ($n_{\rm H} \ll n_{\rm H_2}$), hat man $\mu = \frac{7}{3}$.

- Für die Masse des Protosterns wird $M/M_\odot$=1 angenommen.

- Die Bestimmung der Akkretionsleuchtkraft $L_{acc} = GM\dot{M}/s$ liefert die Akkretionsrate. Wir wissen, daß die Hälfte dieser Leuchtkraft von der Akkretionsscheibe ausgestrahlt wird, die andere Hälfte von der Grenzschicht zwischen dem Innenrand der Scheibe und dem Protostern [Pringle 1981]. Nach Beobachtungen von T–Tauri–Sternen könnten Werte von ca. $10^{-7} M_\odot$/Jahr realistisch sein [Bertout *et al.* 1988]. Wir werden annehmen, daß $\dot{M}_{-7} = 1$ ist.

- Das Rosseland–Mittel der Opazität (Massenabsorptionskoeffizient) für Silikat– oder Graphitstaub ist von der Größenordnung $100\ldots1000\,\mathrm{cm}^2\,\mathrm{g}^{-1}$. Da das Massenverhältnis Staub–Gas etwa 1 % beträgt, haben wir einen Massenabsorptionskoeffizienten $\kappa_R \approx 1\,\mathrm{cm}^2\,\mathrm{g}^{-1}$ für das Staub–Gas–Gemisch (88).

- α kann nicht genau bestimmt werden, da die Turbulenzprozesse und die von ihnen bewirkte turbulente Reibung in der Scheibe nicht genau bekannt sind. Die α–Abhängigkeit ist aber, wie gesagt, nicht kritisch.

Wir erhalten mit diesen Annahmen und α=0.01 folgende Werte bei s=1 AE:

$$T_c \approx 680\,\mathrm{K}$$

$$P \approx 10\,\mathrm{dyn\,cm}^{-2} = 10^{-5}\,\mathrm{Atm}$$

$$H \approx 6 \cdot 10^{11}\,\mathrm{cm} = 0.04\,\mathrm{AE}$$

$$\Sigma \approx 550\,\mathrm{g\,cm}^{-2}$$

$$v_s \approx 122\,\mathrm{cm\,s}^{-1}\,.$$

Die Schallgeschwindigkeit und die tangentiale Geschwindigkeit betragen bei diesem Radius $c_s \approx 1.9\,\mathrm{km\,s}^{-1}$ und $v_\phi \approx 29\,\mathrm{km\,s}^{-1}$. Wir sehen dann, daß $c_s \ll v_\phi$ gilt. Außerdem ist die Scheibe wirklich dünn, da $H/s = 0.04$.

Die optische Tiefe τ in vertikaler Richtung ist durch $\tau = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_R$ gegeben d.h. es ist $\tau \approx 225$ im Rahmen unserer Abschätzung. Die Scheibe ist dann, wie in (18) vorausgesetzt, wirklich optisch dick, so lange die Akkretionsrate einen nicht zu kleinen Wert annimmt.

Die Masse der Scheibe ist gegeben durch

$$M_s = 2\pi \int_{s_*}^{s_0} \Sigma s ds \sim 9.7 \cdot 10^{27} {s_0}^{\frac{7}{5}} \left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{\frac{4}{5}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{5}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{3}{5}} {\kappa_R}^{-\frac{1}{5}}\,. \tag{38}$$

s_0 ist hier der äußere Radius der Scheibe. Mit unseren Werten, s_0=40 AE und α=0.1 erhalten wir $M_s \sim 2 \cdot 10^{31}$g $\approx 10^{-2} M_\odot \ll M$. Solange α einen nicht zu kleinen Wert annimmt ($\alpha \approx 0.001$), ist die Masse der Scheibe wirklich vernachlässigbar klein gegenüber der Masse des akkretierenden Sterns, wie in (30) vorausgesetzt wurde.

3.8 Vereinfachung des Problems

Die Gleichungen können vereinfacht werden, indem man den Wert der Flächendichte Σ bei einem bestimmten Radius festlegt. Wir verwenden den kanonischen Wert für Σ:

$$\Sigma(s = 1\ \mathrm{AE}) = 2500 \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^2}\right] \tag{39}$$

und erhalten dann (siehe Anhang B):

$$\Sigma = 2500\, s^{-\frac{3}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^2}\right] \tag{40}$$

$$T_c = 997\, s^{-\frac{9}{10}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{4}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{4}} \kappa_R^{\frac{1}{4}} \quad [\mathrm{K}] \tag{41}$$

$$P = 71.65\, s^{-\frac{51}{20}} \left(\frac{1}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{5}{8}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{8}} \kappa_R^{\frac{1}{8}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm\, s}^2}\right] \tag{42}$$

$$H = 1.446 \cdot 10^{12}\, s^{\frac{21}{20}} \left(\frac{1}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{3}{8}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{8}} \kappa_R^{\frac{1}{8}} \quad [\mathrm{cm}] \tag{43}$$

$$v_s = 26.94\, s^{-\frac{2}{5}} \dot{M}_{-7} \quad \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right]. \tag{44}$$

Die Opazität κ_R in diesen Gleichungen ist radiusabhängig (siehe Kap. 5.1). Da die Geschwindigkeit in der hier verwendeten Näherung unabhängig von der Opazität ist, können wir v_s integrieren und erhalten für die Entfernung eines bestimmten Gaselements vom Zentralstern als Funktion der Zeit t:

$$s^{1.4} = {s_0}^{1.4} - 2.52 \cdot 10^{-12} \dot{M}_{-7} t\,. \tag{45}$$

Im allgemeinen Fall (37) kann die Geschwindigkeit nicht analytisch integriert werden, da die Radiusabhängigkeit der Opazität erst durch die Lösung für P und T_c bestimmt wird. s ist dann eine zusätzliche Variable und die Geschwindigkeit muß numerisch integriert werden. Dadurch wird s bei einer Modellrechnung bei jedem Integrationsschritt geliefert.

3.9 Zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung der Materie

Wir wollen hier das Prinzip der Bestimmung der chemischen Zusammensetzung in einer protoplanetaren Akkretionsscheibe erläutern. Die Einzelheiten für die verschiedenen Spezies, den Staub und die Opazität können aus den entsprechenden Kapiteln entnommen werden.

Es wird eine Akkretionsscheibe mit einem bestimmten Außenradius (wir werden hier 40 AE annehmen) betrachtet. An deren Außenrand wird die chemische Zusammensetzung als Anfangsbedingung vorgegeben. Die chemische Entwicklung wird dann in einem Gaselement verfolgt, welches sich mit der radialen Geschwindigkeit v_s (44) in Richtung Zentrum bewegt und dabei unterschiedliche Temperaturen (41) und Drucke (42) annimmt, die zu einer Änderung seiner chemischen Zusammensetzung führen. Die Berechnung der Temperatur erfolgt in jedem Integrationsschritt in selbstkonsistenter Weise unter Berücksichtigung der Staubopazität und einer Näherung für die Gasopazität. Die Staubteilchen liefern erst bei der Verdampfung ihrer Eismäntel und dann bei ihrer eigenen Verdampfung verschiedene

Atome und Moleküle in die Gasphase und verändern dadurch deren chemische Zusammensetzung. Die Chemie in der Akkretionsscheibe kann dann in ihrem zeitlichen Verlauf verfolgt werden.

4 Staubverdampfung und Staubbildung in der Scheibe

Die Temperatur– und Druckbedingungen am Außenrand der protoplanetaren Akkretionsscheibe sind den Bedingungen im interstellaren Medium ähnlich. Die Materie, die in die Scheibe einfällt, besteht aus „unberührten" Staubteilchen (hauptsächlich Silikat, Kohlenstoff und Troilit) aus der umgebenden Molekülwolke und muß der chemischen Zusammensetzung in dieser Wolke entsprechen. In den früheren Kapiteln haben wir die Zusammensetzung der kosmischen Materie (Atome, Moleküle, Staub) kennengelernt. Wir können jetzt ein einfaches Modell für den Staub definieren.

Theoretisch können verschiedene Prozesse die Staubteilchen zerstören. Nicht alle werden im Rahmen unseres Modells der protoplanetaren Akkretionsscheibe berücksichtigt. Die Staubteilchen können durch die folgenden Prozesse modifiziert werden:

- Koagulation: Die Änderung der Teilchengröße durch Koagulation wird in unserem Modell vernachlässigt. Dieser Prozeß ist aber höchstwahrscheinlich wichtig, selbst wenn die Staubdichte klein ist (z.B. am Außenrand der Scheibe). Wie Rechnungen zeigen, ist die Zeitskala eines Koagulationsprozesses von der Größenordnung der Akkretionszeitskala. Die Ergebnisse von Ossenkopf (1993) zeigen, daß die ursprüngliche MRN–Verteilung durch Koagulation nach 10^5 Jahren erheblich modifiziert wird (die Akkretionszeitskala beträgt ca. 10^5 bis 10^6 Jahre). Wenn wir am Außenrand eine bestimmte Radiusverteilung für die Staubteilchen annehmen, kann es sein, daß sich diese Verteilung sehr schnell ändert. Der Einfluß auf die gesamte Opazität kann drastisch sein. Die Betrachtung von Koagulationsprozessen erfordert aber eine spezielle numerische Behandlung, deren gleichzeitige Berücksichtigung neben der Chemie zu aufwendig ist. Wir werden annehmen, daß die ursprüngliche Radiusverteilung unberührt bleibt, d.h. daß keine Koagulation stattfindet.

- Erosion: Erosionsprozesse der Staubkörner durch chemische Oberflächenreaktionen mit Atomen oder Molekülen in der Gasphase können eine wesentliche Rolle spielen. Die wichtigsten Spezies in diesem Fall sind natürlich H_2 und H. Es findet keine Erosion der Silikatteilchen durch Wasserstoff statt und die Ergebnisse von Duschl *et al.* (1995) lassen vermuten, daß die Erosion der Kohlenstoffteilchen durch Wasserstoffatome unter den in einer Akkretionsscheibe herrschenden Temperatur– und Druckbedingungen unwahrscheinlich ist. Dagegen ist die Erosion durch OH–Moleküle in manchen Gebieten der Scheibe von großer Bedeutung. OH ist unter den O–haltigen Spezies die wichtigste für Oxidationsprozesse von Ruß [El–Gamal 1995]. Dieses entsteht, wenn H_2O (die häufigste sauerstoffhaltige Spezies neben CO) mit H reagiert:

  $$\mathrm{H} + \mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{OH} + \mathrm{H_2}\,.$$

  Wenn wir Ionisationsprozesse berücksichtigen, müssen wir auch die Erosion durch freie O–Atome betrachten. Die chemischen Prozesse, die zu ausreichend hohen Sauerstoffdichten führen, sind im Kap. 4.2.3 erläutert.

- Absorption von Strahlung: In dieser Arbeit wird die chemische Zusammensetzung der Materie in der Zentralebene der Akkretionsscheibe untersucht. Wir haben eine optisch dicke Scheibe, d.h. es existieren in ihren kühlen Bereichen *keine* energiereichen Photonen und eine Zerstörung der Staubteilchen durch UV–Strahlung kann außer Acht gelassen werden.

- Wenn die Materie eine ausreichend hohe Temperatur erreicht, verschwinden die Staubteilchen durch Verdampfung und Zersetzung. Dies ist neben dem Oxidationsprozeß der einzige Zerstörungsprozeß für Staub, den wir in dieser Arbeit berücksichtigen.

4.1 Silikatstaub

4.1.1 Zusammensetzung

Die Ergebnisse von Mathis *et al.* (1977) lassen vermuten, daß der Staub hauptsächlich aus Magnesium–Eisen–Silikaten $Mg_xFe_{2-x}SiO_4$ und Kohlenstoffteilchen besteht. Die Magnesium–Eisen–Silikatteilchen haben eine amorphe Struktur, obwohl diese Struktur bei einer ausreichenden Temperatur (etwa 1100 K) und genügend langer Erwärmung in eine kristalline Struktur umgewandelt werden kann [Nuth & Donn 1982]. Die Wahl des Parameters x ist problematisch. Wenn wir annehmen, daß alles verfügbare Mg und Fe in den Magnesium–Eisen–Silikatteilchen (Olivin) gebunden ist, haben wir $x \approx 1$, da Mg und Fe ähnliche Häufigkeiten haben [Anders & Grevesse 1989]. Diese Wahl wird auch von Greenberg & Li (1996) bestätigt. Auf der anderen Seite zeigen Analysen der Koma des Halleyschen Kometen ein Verhältnis von ca. Fe/(Fe+Mg)≈0.3. Die Annahme $x = 2$ könnte dann sinnvoll sein. Eine genaue Festlegung von x (also $x = 2$ – kein Fe oder $x = 0$ – kein Mg) ist wichtig, da die thermodynamischen Eigenschaften des Staubmaterials davon abhängen. Da keine genauen thermodynamischen Daten für eine Mischung $Mg_xFe_{2-x}SiO_4$ verfügbar zu sein scheinen, nehmen wir Mg_2SiO_4 als Modell für die Silikatteilchen, obwohl die tatsächlichen Magnesium–Eisen–Silikatteilchen ganz anders aussehen könnten.

4.1.2 Zersetzung der Silikatteilchen

Silikatteilchen verdampfen nicht in der Form, daß sie das Grundmolekül Mg_2SiO_4 in die Gasphase injizieren. Dieses Molekül existert als freies Molekül nämlich nicht. In diesem Fall verlassen die Elemente Mg, Si und O die feste Phase und bilden Moleküle, die aus diesen drei Spezies entstehen können. Atom– oder Molekülgruppen entstehen dann, reagieren in der Gasphase und bilden stabile Moleküle. Man spricht von „Zersetzung" der Silikatteilchen. Das stabilste Molekül, das sich bilden kann, ist SiO. Die Verdampfung des Festkörpers Mg_2SiO_4 könnte nach dem folgenden Schema erfolgen:

$$\mathrm{Mg_2SiO_4\,(fest)} \longrightarrow \mathrm{2Mg + SiO + 3O}\,.$$

Wenn sich die Gasphase im thermodynamischen Gleichgewicht mit dem Festkörper befindet, lassen sich die Partialdrucke der Moleküle und Atome anhand der Methoden der chemischen Thermodynamik berechnen. Die Beziehung zwischen der Temperatur T und den Partialdrucken p_v kann durch den folgenden Ausdruck approximiert werden:

$$\log p_v = \frac{x_1}{T} + x_2 + x_3 T + x_4 T^2 + x_5 T^3\,. \tag{46}$$

Die Koeffizienten x_i und die Methode zu derer Bestimmung sind für Dampf über dem Silikat Mg_2SiO_4 in Duschl *et al.* (1995) angegeben. Abb. 2 zeigt die chemische Zusammensetzung der Gasphase im Gleichgewicht mit dem Festkörper.

Wir sehen, daß fast das ganze Silizium im Molekül SiO gebunden ist. SiO_2 und MgO sind relativ selten und es existieren praktisch keine freien Si–Atome in der Gasphase. Ein Großteil des Sauerstoffes ist in O_2 gebunden. Der Rest ist als freies Atom anwesend. In dieser idealisierten Situation haben wir selbstverständlich keine anderen Spezies in der

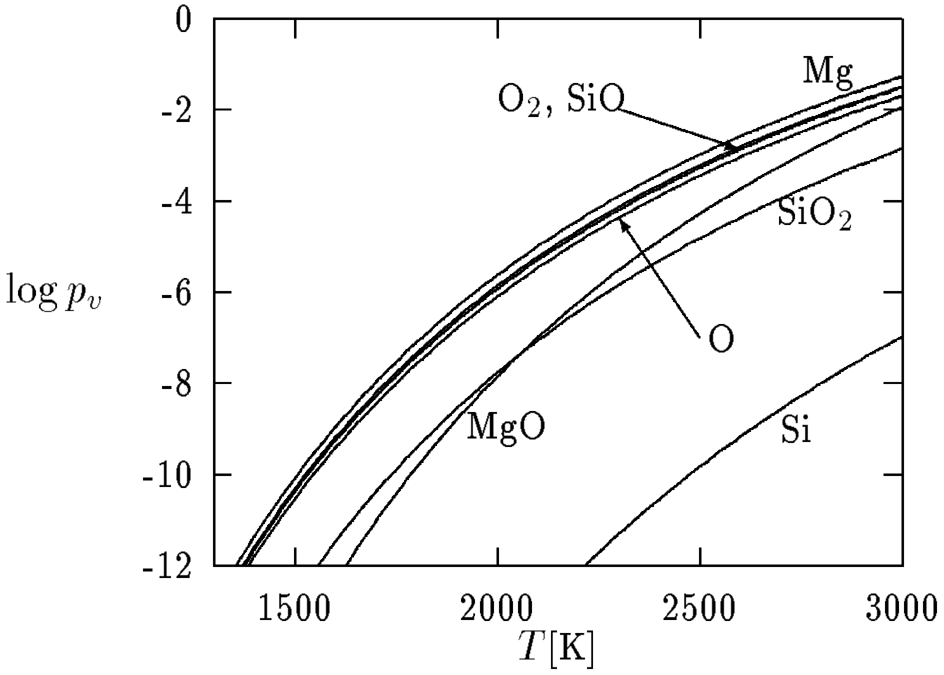

Abbildung 2: *Chemische Zusammensetzung des Dampfes über* Mg_2SiO_4 *im Gleichgewicht.*

Gasphase, sodaß keine Reaktionen möglich sind. Wenn, wie schon erwähnt, H und H_2 in großen Mengen anwesend sind, dann reagieren Moleküle wie MgO und SiO_2 mit H bzw. H_2 zu Mg und SiO und bilden dabei H_2O oder OH. Somit kann die Wahl des obigen Verdampfungsprozesses begründet werden.

4.2 Kohlenstoffstaub

4.2.1 Zusammensetzung

Die zweite wichtige Staubsorte ist Kohlenstoffstaub. Die genaue Zusammensetzung dieses Staubs ist unklar. Da die Kohlenstoffteilchen in den äußeren Hüllen von C–Sternen entstehen, ist zu erwarten, daß diese Teilchen aus einer Mischung von Kohlenstoff und Wasserstoff bestehen (die C–H–Bindungen sind im interstellaren Medium häufig). Die Struktur dieser Teilchen ist sehr wahrscheinlich stark amorph, da sie unter Nichtgleichgewichtsbedingungen entstehen. Bis jetzt sind keine kristallinen Kohlenstoffteilchen (Diamant, Graphit) entdeckt worden (in Meteoriten mit unsprünglicher Zusammensetzung finden sich geringe Mengen Diamant und Graphit, aber dieser macht nur einen sehr kleinen Teil des vorhandenen Kohlenstoffs aus [Bernatowicz *et al.* 1991]). Da keine thermodynamischen Daten für amorphen Kohlenstoff bekannt zu sein scheinen, nehmen wir einfach Graphit. Graphit hat eine kristalline Struktur und enthält ausschließlich C–Atome, was die Behandlung der Verdampfung stark vereinfacht.

4.2.2 Verdampfung der Kohlenstoffteilchen

Die Verdampfung von Kohlenstoffteilchen ist nicht so problematisch, da wir angenommen haben, daß sie nur C–Atome enthalten. Der Dampf besteht ausschließlich aus C_i–Molekülen, wobei Verbindungen mit $i > 5$ vernachlässigt werden. Wie für das Silikat, wird der Dampfdruck durch ein Polynom approximiert:

$$\log p_v = \frac{x_1}{T} + x_2 + x_3 T + x_4 T^2 + x_5 T^3 \,. \tag{47}$$

Die Koeffizienten x_i sind in Duschl *et al.* (1995) angegeben.

Die chemische Zusammensetzung der Gasphase im Gleichgewicht mit dem Festkörper zeigt Abb. 3. Es ist offensichtlich, daß nur C_1 und C_3 in der Gasphase wirklich häufig sind.

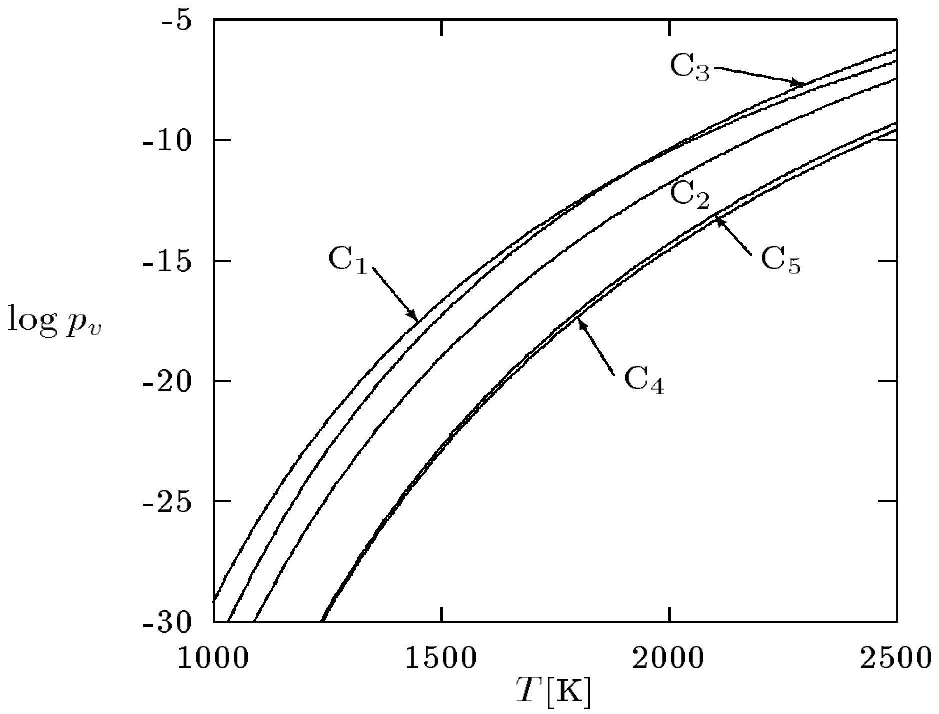

Abbildung 3: *Chemische Zusammensetzung des Dampfes über Graphit im Gleichgewicht.*

4.2.3 Kohlenstoffoxidation

Wir haben schon erwähnt, daß der Kohlenstoffstaub von den in der Gasphase anwesenden Molekülen oxidiert werden kann. Oxidationsprozesse sind mit sauerstoffhaltigen Molekülen möglich. Sauerstoff ist in protoplanetaren Akkretionsscheiben sehr häufig, d.h. es sind zahlreiche sauerstoffhaltige Moleküle in der Gasphase vorhanden. Diese Moleküle können an der Oberfläche der Staubkörner reagieren und bilden kohlenstoff– und sauerstoffhaltige Spezies, die in die Gasphase injiziert werden. Die Moleküle und Atome, die eine Rolle bei der Oxidation des Kolenstoffstaubs spielen können, sind H_2O, O, O_2, NO, CO_2, CO und OH. Die verschiedenen Oxidationsmechanismen sind von El–Gamal (1995) diskutiert worden. Die Oxidation durch H_2O, CO_2 und NO wurde experimentell untersucht und ist danach von zweitrangiger Bedeutung. Sauerstoffatome sind im Rahmen der neutralen Chemie aufgrund ihrer geringen Konzentration in der Gasphase vernachlässigbar. Sie spielen aber eine große Rolle, wenn Ionisationsprozesse berücksichtigt werden. CO kann wegen seiner hohen Bindungsenergie und Reaktionsträgheit beiseite gelassen werden. Nach El–Gamal (1995) sind O_2 und OH für die Rußoxidation besonders wirksam. In einer protoplanetaren Scheibe hat das Molekül O_2 eine zu geringe Konzentration und ist für die Oxidation ineffizient. Es ist aber zu beachten, daß O_2 in der Erdatmosphäre sehr häufig ist, sodaß Rußoxidation durch O_2 unter diesen Bedingungen ein Prozeß von grundlegender Bedeutung ist. Eine Kohlenstoffoxidation ist in einer protoplanetaren Scheibe jedoch nur durch OH oder O möglich.

Oxidation durch OH:
In unserem Modell wird OH hauptsächlich durch die Reaktion zwischen H_2O und H gebildet:

$$H_2O + H \longrightarrow OH + H_2 \, .$$

In dem Bereich, in dem diese Reaktion stattfindet, sind die Teilchendichten von H_2O und H hoch (über 10^{11} Teilchen/cm^3) und OH wird in großer Menge produziert. Der eigentliche Oxidationsprozeß ist die Reaktion [El–Gamal 1995]:

$$\mathrm{soot}_{N+2} + OH \longrightarrow \mathrm{soot}_N + HCCO \, .$$

Das Ketyl–Radikal HCCO wird in die Gasphase injiziert. HCCO reagiert dort mit H und erzeugt CH_2:

$$HCCO + H \longrightarrow CH_2 + CO \, .$$

Der Verlust von zwei Kohlenstoffatomen von der Oberfläche des Staubteilchens liefert zunächst ein CO–Molekül und ein Methylenradikal. CH_2 reagiert dann mit H_2 und erzeugt CH_3, das seinerseits weiter mit H_2 reagiert und CH_4 erzeugt:

$$CH_2 + H_2 \longleftrightarrow CH_3 + H \, ,$$

$$CH_3 + H_2 \longleftrightarrow CH_4 + H \, .$$

CH_4 reagiert durch zahlreiche Reaktionen (siehe Kap. 7) zu CO. Es ist zu erwarten, daß dabei eine große Zahl organischer Zwischenprodukte auftreten, bis die Temperaturen so hoch sind, daß diese dissoziiert werden.

Oxidation durch O:
Trotz der tiefen Temperaturen können in den Außenregionen der Scheibe (s >10 AE) freie O–Atome entstehen und die Kohlenstoffteilchen oxidieren, wenn Ionisationsprozesse berücksichtigt werden. CO–Moleküle können von der kosmischen Strahlung (c.r.) ionisiert werden:

$$CO + \mathrm{c.r.} \longrightarrow CO^+ + e^- \, .$$

Eine dissoziative Rekombination zwischen CO^+ und e^- führt zu C und O:

$$CO^+ + e^- \longrightarrow C + O \, .$$

Eine andere Möglichkeit ist die Ionisation von H_2 durch die kosmische Strahlung oder die anwesenden radioaktiven Kerne (wie wichtig die kosmische Strahlung ist, werden wir im Kap. 7.6 untersuchen).

$$H_2 + \mathrm{c.r.} \longrightarrow {H_2}^+ + e^- \, .$$

${H_2}^+$ kann mit CO bzw. H_2O reagieren und durch Ladungsaustauschreaktion CO^+ bzw. H_2O^+ bilden:

$$H_2^+ + CO \longrightarrow H_2 + CO^+ .$$

bzw.

$$H_2^+ + H_2O \longrightarrow H_2 + H_2O^+ .$$

CO^+ reagiert dann zu C und O. H_2O^+ kann mit OH reagieren:

$$H_2^+ + OH \longrightarrow O + H_3O^+ .$$

Dabei werden O–Atome in die Gasphase injiziert.

Der angenommene Oxidationsprozeß durch O–Atome ist:

$$\mathrm{soot}_{N+1} + O \longrightarrow \mathrm{soot}_N + CO$$

CO wird dann direkt in die Gasphase injiziert [Warnatz 1996].

Auf jeden Fall ist festzustellen, daß eine Oxidation der Kohlenstoffteilchen durch freie O–Atome in einem Modell ohne Ionisationsprozesse gar nicht vorkommt. Kein rein chemischer Prozeß ist in der Lage, die Moleküle CO und H_2O bei Temperaturen unter 1000 K aufzubrechen und dabei O freizusetzen. Wenn dies durch thermische Dissoziation möglich ist, sind die Kohlenstoffteilchen schon verschwunden (siehe Kap. 7).

4.3 Troilit

4.3.1 Zusammensetzung

Wie im Kap. 2.3 erwähnt, sind auch FeS–Staubteilchen im interstellaren Medium anwesend. Wir nehmen an, daß der ganze verfügbare Schwefel als Troilit anwesend ist. Nach den Ergebnissen von Pollack *et al.* (1994) ist in der protoplanetaren Scheibe eigentlich nur 75 % des verfügbaren Schwefels im Troilit gebunden, dies aufgrund der Gasphasenreaktionen, die am Rande der Scheibe durch den Schock zusätzliche FeS–Moleküle produzieren (Troilit entsteht nämlich durch die Reaktion zwischen gasförmigem H_2S und festem Fe), die anschließend als Staub kondensieren können. 20 % des Schwefels ist in der Gasphase als S oder H_2S und die restlichen 5 % als Eis (H_2S, SO, SO_2) vorhanden [Pollack *et al.* 1994]. Allerdings ist Eisen auch in den Silikatteilchen gebunden (Kap. 4.1.1). Da wir aber nichts über diese Eisenmenge wissen (Kap. 4.1.1 – Festlegung von x), lassen wir sie außer Acht.

4.3.2 Zersetzung der Troilitteilchen

Beim Verdampfen injizieren die Troilitteilchen überwiegend freie Fe– und S–Atome. FeS–Moleküle werden ebenfalls in die Gasphase injiziert, aber thermodynamische Betrachtungen zeigen, daß deren Häufigkeit um einen Faktor 10 kleiner ist, als die Häufigkeit der freien Atome Fe und S. Wir nehmen dann an, daß die Troilitteilchen sich nur in Fe und S zersetzen, und wir vernachlässigen die FeS–Moleküle. Der Zersetzungsprozeß ist somit:

$$\mathrm{FeS\,(fest)} \longrightarrow \mathrm{Fe} + \mathrm{S} .$$

Die Anwendung des Massenwirkungsgesetzes liefert

$$1 = p_{\mathrm{Fe}} p_{\mathrm{S}} \exp(-\frac{\Delta G}{\mathcal{R}T}) \,. \tag{48}$$

Wenn nur freie Fe– und S–Atome injiziert werden, sind die Partialdrucke p_{Fe} und p_{S} im Dampf einander gleich, sodaß

$$p_{\mathrm{Fe}} = p_{\mathrm{S}} = \exp(\frac{\Delta G}{2\mathcal{R}T}) \,. \tag{49}$$

ΔG ist die freie Bildungsenthalpie der Troilitteilchen aus ihren Elementen in der Gasphase. Sharp & Huebner (1990) haben die freie Bildungsenthalpie ΔG vom Troilit und von verschiedenen anderen Kondensaten durch ein Polynom dritter Ordnung approximiert

$$\Delta G = \frac{x_1}{T} + x_2 + x_3 T + x_4 T^2 + x_5 T^3 \tag{50}$$

und die Koeffizienten x_i angegeben. Der Gleichgewichtsdampfdruck kann damit für einen weiten Temperaturbereich berechnet werden.

4.4 Mathematische Behandlung der Zersetzung, Verdampfung und Oxidation

4.4.1 Die Größenverteilung

Die von Mathis *et al.* (1977) eingeführte Radiusverteilung für die interstellaren Staubteilchen haben wir schon im Kap. 2.4.2 erwähnt. Sie lautet:

$$n(a) = C a^{-3.5} \,. \tag{51}$$

$n(a)da$ ist die Anzahl der Staubteilchen mit Radius zwischen a und $a + da$ pro Wasserstoffkern. Die Teilchenradien liegen im Bereich $a_- = 0.005\,\mu$m bis $a_+ = 0.25\,\mu$m. Wir haben dann:

$$n(a) = \begin{cases} 0 & \text{für} \quad a < a_- \\ C a^{-3.5} & \text{für} \quad a_- \le a \le a_+ \\ 0 & \text{für} \quad a > a_+ \end{cases} \tag{52}$$

C ist eine Konstante. Wir verwenden $\log C = -15.20$ für Kohlenstoffstaub und $\log C = -15.14$ für Silikatstaub. Mathis *et al.* (1977) haben andere Werte für $\log C$ angegeben, weil sie die Elementhäufigkeiten von Cameron (1973) verwendet haben. In dieser Arbeit verwenden wir die neueren Häufigkeiten von Anders & Grevesse (1989).

Mit der Radiusverteilung definieren wir das Moment

$$K_i = \int_{a_-}^{a_+} n(a) a^i da \,. \tag{53}$$

Wenn wir davon ausgehen, daß die Teilchen sphärisch sind, erlaubt K_i die Bestimmung folgender physikalischer Größen:

- $\frac{4\pi}{3} N_{\mathrm{H}} K_3$ ist das Volumen der Staubteilchen in $1\,\mathrm{cm}^3$,
- $4\pi N_{\mathrm{H}} K_2$ ist die Oberfläche der Staubteilchen in $1\,\mathrm{cm}^3$,
- $N_{\mathrm{H}} K_0$ ist die Gesamtzahl der Staubteilchen in $1\,\mathrm{cm}^3$, d.h. die Teilchendichte.

$N_{\rm H}$ ist hier die Gesamtzahl der Wasserstoffkerne pro cm^3, d.h. $N_{\rm H} = n_{\rm H} + 2n_{\rm H_2}$.

Das Gesamtvolumen der Staubteilchen ist

$$V = \frac{4\pi}{3} N_{\rm H} \int_{a_-}^{a_+} n(a) a^3 da = \frac{8\pi}{3} N_{\rm H} C (a_+^{\frac{1}{2}} - a_-^{\frac{1}{2}}) . \tag{54}$$

Wenn wir durch das Volumen V_0 dividieren, das der „Grundbaustein“ (Mg_2SiO_4 für Silikat und C für Kohlenstoff) im Kondensat hat, erhalten wir die Häufigkeit ϵ des Schlüsselatoms (Si für Silikat und C für Kohlenstoff) mal dem Bruchteil f dieses Atoms im Kondensat. Mathis *et al.* (1977) haben gefunden, daß das ganze verfügbare Silizium im Silikat und 70% des verfügbaren Kohlenstoffs im Kohlenstoffstaub gebunden ist. Man hat dann $f = 1$ für Silikat und $f = 0.7$ für Kohlenstoff. Die Konstante C läßt sich dann so ausdrücken:

$$C = \epsilon f V_0 \frac{3}{8\pi} \frac{1}{a_+^{\frac{1}{2}} - a_-^{\frac{1}{2}}} . \tag{55}$$

Es ist dann klar, daß ein anderer Wert der verwendeten Häufigkeiten zu unterschiedlichem C führt.

Es ist zu beachten, daß wir die Radiusverteilung nur für die Silikat– und die Graphitteilchen verwenden. Für die Troilitteilchen nehmen wir einfach Teilchen mit einheitlichen Radien an. Der Grund ist, daß nur die Silikat– und Graphitteilchen zur Gesamtopazität beitragen. Wir führen hauptsächlich deswegen eine Größenverteilung für diese Staubteilchen bei der numerischen Behandlung der Verdampfung ein, um zu vermeiden, daß diese bei der Verdampfung alle zusammen instantan verschwinden. Es wurde auch der Fall einheitlicher Staubteilchenradien getestet, aber dabei ergaben sich numerische Schwierigkeiten durch die abrupte Änderung der Opazität beim Verschwinden der letzten Staubteilchen[1]. In unserem Modell tragen die Troilitteilchen nicht zur Opazität bei, sodaß deren Radiusverteilung nicht kritisch in die Ergebnisse der numerischen Rechnung eingeht.

4.4.2 Die Rekombinations– und Dissoziationsrate – Numerische Behandlung

Ein Staubteilchen liefert bei der Verdampfung bestimmte Spezies in die Gasphase. Wir wollen hier die *Rekombinationsrate* (d.h. die Zahl der Spezies, die pro Zeiteinheit mit dem Festkörper rekombinieren) und die *Dissoziationsrate* (Zahl der Spezies, die pro Zeiteinheit den Festkörper verlassen) bestimmen.

Die Rekombinationsrate J_i^r für eine bestimmte Spezies i ist

$$J_i^r = \alpha_i n_i v_i S . \tag{56}$$

n_i ist die Konzentration der Spezies i in der Gasphase, v_i ist die thermische Geschwindigkeit, S ist die Oberfläche des betreffenden Staubteilchens und α_i ist ein sog. „Sticking–Koeffizient“ (α_i ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Atom oder das Molekül i beim Stoß mit dem Festkörper rekombiniert).

Im thermischen Gleichgewicht ist die Dissoziationsrate J_i^d gleich der Rekombinationsrate:

[1] Die Modellrechnung hat ergeben, daß die Verdampfung der Staubteilchen sehr nahe dem Zustand des thermodynamischen Gleichgewichts erfolgt. In diesem Fall hängen die Details des Verdampfungsprozesses nicht von der genauen Verteilung der Staubteilchenradien ab. Das numerische Verfahren allerdings hängt bezüglich der erforderlichen Zeitschrittweiten sehr empfindlich von der angenommenen Verteilung der Radien ab.

$$J_i^d = \alpha_i S v_i \frac{P^{eq}}{kT}\,, \tag{57}$$

wobei k die Boltzmann–Konstante und P^{eq} der Partialdruck der Spezies im chemischen Gleichgewicht zwischen dem Festkörper und seinem Dampf ist. Diese Gleichung bleibt gültig, auch wenn der Festkörper nicht im thermischen Gleichgewicht mit der Gasphase ist, da die Dissoziationsrate nur von den physikalischen Eigenschaften des Kondensats abhängt.

Die Netto–Verlustrate des Staubs ist somit $J_i = J_i^d - J_i^r$, d.h.

$$J_i = \alpha_i S v_i \left(\frac{P^{eq}}{kT} - n_i \right). \tag{58}$$

Die thermische Geschwindigkeit ist

$$v_i = \sqrt{\frac{2kT}{m_i}}\,, \tag{59}$$

wobei m_i die Masse der Spezies i ist. Die Netto–Verlustrate des Staubs ist dann

$$J_i = \alpha_i S \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \left(\frac{P^{eq}}{kT} - n_i \right). \tag{60}$$

Wenn $J_i < 0$, dann ist die Rekombinationsrate größer als die Dissoziationsrate und die Staubteilchen wachsen. Umgekehrt, wenn $J_i > 0$, dann ist die Dissoziationsrate größer als die Assoziationsrate und der Staub verschwindet.

Praktisch muß man wissen, welche Spezies in die Gasphase injiziert werden und man muß für jede Spezies eine eigene Verdampfungsrate J_i definieren.

Wir wollen jetzt die Größenverteilung der Teilchen berücksichtigen und betrachten dafür ein Teilchen mit Radius a. Sei V das Volumen dieses Teilchens. Die Änderung des Volumens mit der Zeit ist

$$\frac{dV}{dt} = 4\pi a^2 \frac{da}{dt} = S\frac{da}{dt}\,. \tag{61}$$

Außerdem gilt

$$\frac{dV}{dt} = V_0 J_i\,, \tag{62}$$

wobei V_0 das Volumen ist, das das Grundmolekül im Festkörper einnimmt. Wir haben

$$V_0 = \frac{A m_{\rm H}}{\rho_F}\,. \tag{63}$$

A ist das Molekulargewicht des Moleküls, $m_{\rm H}$ die Masse des Wasserstoffatoms und ρ_F die Dichte des Festkörpers. Die Änderung des Radius ist dann

$$\frac{da}{dt} = -J_i \frac{V_0}{S} \tag{64}$$

und wir erhalten

$$\frac{da}{dt} = \alpha_i V_0 v_i \left(n_i - \frac{P^{eq}}{kT} \right). \tag{65}$$

Die Radiusänderung der Kohlenstoffteilchen aufgrund der Oxidation durch OH ist

$$\frac{da}{dt} = -\alpha_{\mathrm{OH}} V_0 v_i n_{\mathrm{OH}} \,. \tag{66}$$

Entsprechend haben wir aufgrund der Oxidation durch O

$$\frac{da}{dt} = -\alpha_{\mathrm{O}} V_0 v_i n_{\mathrm{O}} \,. \tag{67}$$

Es ist zu beachten, daß bei der Oxidation keine Rückwärtsreaktion berücksichtigt wird, da der durch die Oxidation verlorene Kohlenstoff in CO gebunden wird und nicht wieder in den Staub eingebaut werden kann (Kap. 4.2.3).

Wir nehmen an, daß alle Teilchen bei der Verdampfung *sphärisch* bleiben. Wenn das der Fall ist, kann man beweisen, daß die Verteilung während des ganzen Prozesses gültig bleibt. Mathematisch können wir uns einfach vorstellen, daß die Verteilung während der Verdampfung um einen Betrag Δa nach links verschoben wird (siehe Abb. 4). Die Änderung der Verschiebung Δa mit der Zeit ist gleich der Änderung des Teilchenradius. Allerdings muß man berücksichtigen, daß Δa *zunimmt*, während a *abnimmt*. Man hat dann

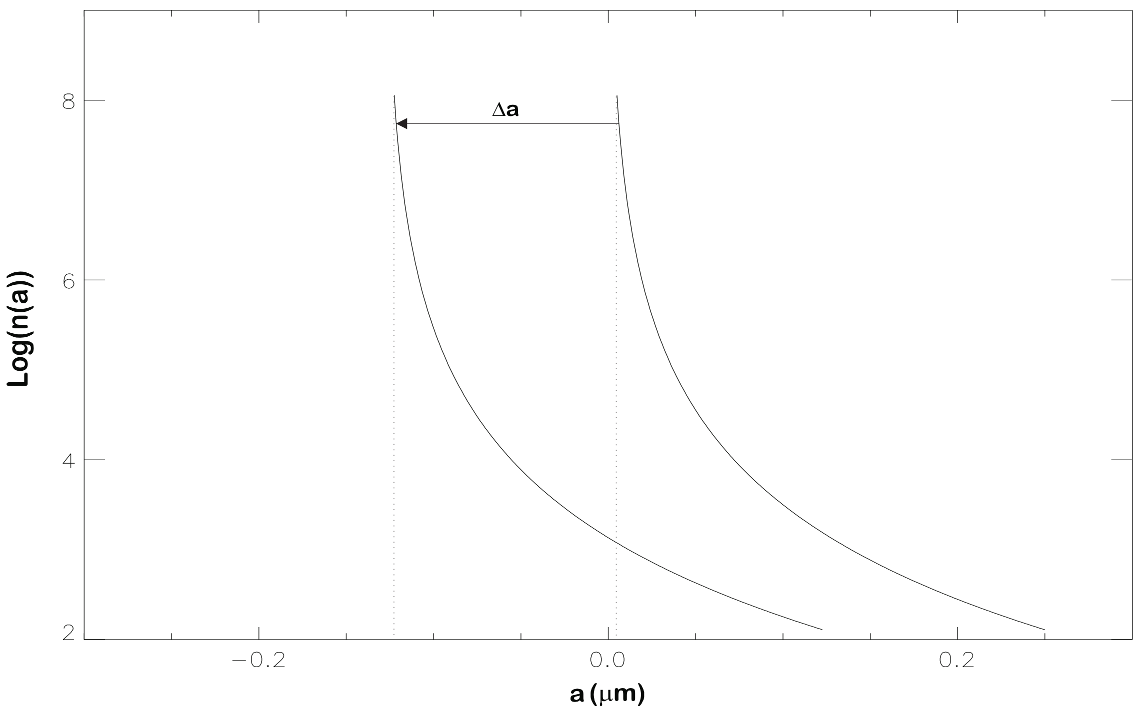

Abbildung 4: *Radiusverteilung der Staubteilchen. Die Verteilung wird nach links um einen Betrag Δa verschoben (C wurde auf 1 gesetzt).*

$$\frac{d\Delta a}{dt} = -\frac{da}{dt} = \alpha_i V_0 v_i \left(\frac{P^{eq}}{kT} - n_i \right) . \tag{68}$$

Der Parameter Δa wird als zusätzliche Variable in unserem Problem behandelt. Die Änderung der Teilchenzahlkonzentration in der Gasphase ist mit der Volumenänderung der noch vorhandenen Staubteilchen verbunden durch die Beziehung

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{1}{V_0}\frac{dV}{dt}\,. \tag{69}$$

Der Verdampfungsprozeß ist beendet, wenn alle Teilchen verschwunden sind, d.h. wenn das Gesamtvolumen null ist. Zu einem beliebigen Zeitpunkt ist die Verteilung um einen Betrag Δa verschoben. Das Gesamtvolumen der Staubteilchen ist dann

$$V = N_{\mathrm{H}}\frac{4\pi}{3}C\int_{a_- - \Delta a}^{a_+ - \Delta a} a^3(a+\Delta a)^{-3.5}da\,, \tag{70}$$

wenn $\Delta a \leq a_-$ und

$$V = N_{\mathrm{H}}\frac{4\pi}{3}C\int_{0}^{a_+ - \Delta a} a^3(a+\Delta a)^{-3.5}da\,, \tag{71}$$

wenn $\Delta a > a_-$. Wenn $V = 0$ ist, dann ist der Verdampfungsprozeß beendet.

Dadurch, daß die Troilitteilchen einen einheitlichen Radius haben, ist die Behandlung ihrer Verdampfung einfach. Wenn wir annehmen, daß keine Rekombinationsprozesse stattfinden, haben wir nach (65) für die Radiusänderung

$$\frac{da}{dt} = -\alpha_{\mathrm{FeS}}V_0\frac{p_{\mathrm{S}}}{kT}v_{\mathrm{FeS}} \tag{72}$$

und nach (69)

$$\frac{dn_{\mathrm{S}}}{dt} = \frac{dn_{\mathrm{Fe}}}{dt} = 4\pi a^2\alpha_{\mathrm{FeS}}v_{\mathrm{FeS}}\frac{p_{\mathrm{S}}}{kT}\,. \tag{73}$$

4.4.3 Eisverdampfung

Wir haben schon erwähnt, daß verschiedene Eissorten im interstellaren Medium anwesend sind. Die Beobachtungen haben gezeigt, daß H_2O und CO die wichtigsten Eissorten in Molekülwolken sind. Dieses Eis befindet sich auf den Staubkörnern und bildet eine Hülle, in die die Staubteilchen eingebettet sind. CO und H_2O als Eis sind höchstwahrscheinlich zusätzlich mit anderen Molekülen (NH_3, H_2CO, HCO und CH_3OH) gemischt. Wir wissen nicht, wie diese Mischungen genau aussehen, deshalb wollen wir annehmen, daß nur CO und H_2O als Eis anwesend sind und wir vernachlässigen die anderen Spezies. Die Verdampfungstemperatur von CO liegt bei etwa 30 K und die vom Wassereis bei etwa 150 K [Sandford & Allamandola 1988]. Als einfaches Modell werden wir dann annehmen, daß sich die Olivinteilchen innerhalb zweier getrennten Hüllen aus H_2O und CO–Eis befinden. Da die Verdampfungstemperatur von CO viel kleiner ist als die von H_2O, sollte die CO–Schicht den äußeren Eismantel bilden (siehe Abb. 5).

Dieses Modell ist eigentlich eine starke Vereinfachung der Realität. Sandford & Allamandola (1988) haben eine Mischung aus H_2O– und CO–Eis erzeugt und deren Eigenschaften untersucht. Das Verhältnis H_2O–CO in der berücksichtigten Mischung ist 20÷1 (dieses Verhältnis ist in manchen Kometen zu beobachten). Sie haben u.a. die Oberflächen– und Volumenbindungsenergien von H_2O und CO und den Einfluß des anwesenden CO auf die Wassereisverdampfung untersucht. Ein wichtiges Resultat dieser Untersuchung ist, daß ein Teil des CO im Wassereis nicht wie erwartet bei 30 K verdampft, sondern im Gitter in einer Clatrath–Struktur „eingesperrt“ bleibt und erst zusammen mit dem Wasser verdampft, d.h. bei ca. 150 K. H_2O scheint die Verdampfung der anderen Spezies zu kontrollieren. Es ist offensichtlich eine starke Vereinfachung der Realität, die Eissorten in zwei Mäntel zu trennen. Ein besseres Modell der Eisverdampfung muß entwickelt werden, wobei CO im H_2O diffundiert und dann verdampft. In dem hier betrachteten Modell verdampft zuerst das CO–Eis, dann das Wassereis und am Ende die Graphit– und Olivinteilchen.

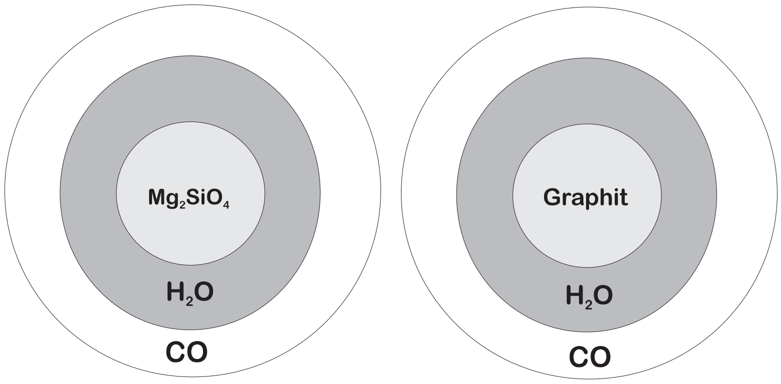

Abbildung 5: *Verwendetes Staubmodell. Die Olivin– und Graphitteilchen sind in eine Hülle von* H_2O– *und* CO–*Eis eingebettet.*

Bei der Berechnung der Eisverdampfung müssen wir die untere Grenze des Integrals (71) modifizieren, da nur die CO– oder H_2O–Schicht verschwindet und nicht das ganze Teilchen. Diese untere Grenze kann dann nicht mehr null werden. Wir führen die Radien $a_+^{\rm CO}$, $a_-^{\rm CO}$, $a_+^{\rm H_2O}$ und $a_-^{\rm H_2O}$ ein. Der Index „+“ (bzw. „–“) bezieht sich auf das größte (bzw. kleinste) Staubteilchen. Wir berücksichtigen z.B. die Verdampfung von CO. Das Gesamtvolumen ist dann

$$V = N_{\rm H}\frac{4\pi}{3}C\int_{a_-^{\rm CO}-\Delta a}^{a_+^{\rm CO}-\Delta a} a^3(a+\Delta a)^{-3.5}da\,, \tag{74}$$

wenn $\Delta a \leq a_-^{\rm CO} - a_-^{\rm H_2O}$ und

$$V = N_{\rm H}\frac{4\pi}{3}C\int_{a_-^{\rm H_2O}}^{a_+^{\rm CO}-\Delta a} a^3(a+\Delta a)^{-3.5}da\,, \tag{75}$$

wenn $\Delta a > a_-^{\rm CO} - a_-^{\rm H_2O}$. Die Verdampfung wird gestoppt, wenn das Volumen der CO–Schicht null ist, oder einfacher wenn $\Delta a = a_+^{\rm CO} - a_+^{\rm H_2O}$. Das Problem der Wasserschichtverdampfung ist genau entsprechend.

Die Änderung des Parameters Δa mit der Zeit und die Änderung der Teilchendichte in der Gasphase aufgrund der Verdampfung sind durch (68) und (69) gekoppelt. Das Volumen V und seine Ableitung dV/dt können einfach analytisch berechnet werden. Wenn

$$V = N_{\rm H}\frac{4\pi}{3}CI \quad \text{mit} \quad I = \int_{\ldots}^{\ldots} a^3(a+\Delta a)^{-3.5}da\,, \tag{76}$$

haben wir

$$I = \sum_{i=0}^{3} A_i \left[a^{3-i}(a+\Delta a)^{-2.5+i}\right]_{\ldots}^{\ldots} \tag{77}$$

mit $A_0 = -\frac{2}{5}, A_1 = -\frac{12}{15}, A_2 = -\frac{48}{15}$ und $A_3 = \frac{96}{15}$. Nach Einsetzen der Integrationsgrenzen und Ableitung nach t bekommt man dV/dt.

4.4.4 Die physikalischen Daten

Um die obige Methode zur Berechnung der Staubverdampfung anwenden zu können, müssen die Dicken der verschiedenen Eisschichten berechnet werden. Das Gesamtvolumen V der Silikatteilchen und die Gesamtzahl N dieser Teilchen können berechnet werden:

$$V = N_{\mathrm{H}} \frac{8\pi}{3} C \left(\sqrt{a_+} - \sqrt{a_-}\right) \tag{78}$$

$$N = -\frac{2}{5} N_{\mathrm{H}} C \left(a_+^{-2.5} - a_-^{-2.5}\right) . \tag{79}$$

Wir nehmen an, daß eine Hälfte der anwesenden CO– und H_2O–Moleküle auf der Oberfläche der Silikatteilchen eingefroren ist. Die andere Hälfte dieser Moleküle befindet sich auf den Graphitteilchen. Betrachten wir nur eine Staubsorte (z.B. Silikat, die Berechnung für die Graphitteilchen ist genau entsprechend). Da jedes Staubkorn mit einer Eisschicht bedeckt ist, bleibt die Gesamtzahl N der Staubteilchen erhalten. Wir verlangen, daß die mit Eis bedeckten Staubteilchen weiter die MRN–Radiusverteilung erfüllen. (79) ist dann mit jedem Radiuspaar $(a_-^{\mathrm{CO}}, a_+^{\mathrm{CO}})$, $(a_-^{\mathrm{H_2O}}, a_+^{\mathrm{H_2O}})$ und (a_-, a_+) erfüllt. Wir haben somit

$$\left(a_+^{\mathrm{CO}}\right)^{-2.5} - \left(a_-^{\mathrm{CO}}\right)^{-2.5} = \left(a_+^{\mathrm{H_2O}}\right)^{-2.5} - \left(a_-^{\mathrm{H_2O}}\right)^{-2.5} = a_+{}^{-2.5} - a_-{}^{-2.5} . \tag{80}$$

Sei V' das Volumen der Staubteilchen *plus* das Volumen der Eisschicht (z.B. der Wassereisschicht). Wir haben

$$V' = \frac{8\pi}{3} C N_{\mathrm{H}} \left(\sqrt{a_+^{\mathrm{H_2O}}} - \sqrt{a_-^{\mathrm{H_2O}}}\right) = \frac{8\pi}{3} C N_{\mathrm{H}} \left(\sqrt{a_+} - \sqrt{a_-}\right) + \frac{1}{2} n_{\mathrm{H_2O}} V_{\mathrm{H_2O}} . \tag{81}$$

$n_{\mathrm{H_2O}}$ ist die Zahl der anwesenden Wassermoleküle pro cm^3, die im Eis gebunden sind und $V_{\mathrm{H_2O}}$ ist das Volumen, das ein Wassermolekül im Eis einnimmt. Der Faktor 1/2 bedeutet, daß nur die Hälfte der verfügbaren Wassermoleküle auf einer Staubsorte eingefroren sind. (80) und (81) können zusammen numerisch gelöst werden und liefern die Radien $a_-^{\mathrm{H_2O}}$ und $a_+^{\mathrm{H_2O}}$. Analog definieren wir V'' als das Volumen der Staubteilchen *plus* das Volumen der Wasserschicht *plus* das Volumen der CO–Schicht:

$$V'' = \frac{8\pi}{3} C N_{\mathrm{H}} \left(\sqrt{a_+^{\mathrm{CO}}} - \sqrt{a_-^{\mathrm{CO}}}\right) = \frac{8\pi}{3} C N_{\mathrm{H}} \left(\sqrt{a_+} - \sqrt{a_-}\right) + \frac{1}{2} n_{\mathrm{H_2O}} V_{\mathrm{H_2O}} + \frac{1}{2} n_{\mathrm{CO}} V_{\mathrm{CO}} , \tag{82}$$

wobei V_{CO} das Volumen ist, das ein CO–Molekül im Eis einnimmt. Da $a_-^{\mathrm{H_2O}}$ und $a_+^{\mathrm{H_2O}}$ jetzt bekannt sind, liefert die Lösung von (80) und (82) die Radien a_-^{CO} und a_+^{CO}.

In der Tab. 2 sind die benötigten physikalischen Daten zusammengefaßt. Die Dampfdrucke für CO und H_2O finden sich in Léger *et al.* (1985). Der Sticking–Koeffizient für H_2O liegt bei etwa 0.9 für $T = 150\,\mathrm{K}$ [Pruppacher & Klett 1978]. Wir benutzen denselben Wert für CO. Die Sticking–Koeffizienten vom Olivin und Troilit sind unbekannt und wir setzen sie einfach gleich 0.1, dem gemessenen Wert für die SiO_2–Verdampfung [Landolt–Börnstein 1968]. Der Koeffizient α der Reaktion von OH mit Graphit (Oxidation) wird ebenfalls auf 0.1 gesetzt. Dieser Wert entspricht den experimentellen Ergebnissen [El–Gamal 1995]. Für die Oxidation durch O nehmen wir α=0.23 nach den Ergebnissen von Von Gersum & Roth (1992). Die Sticking–Koeffizienten für Kohlenstoff finden sich in Landolt–Börnstein (1968).

Tabelle 2: *Verwendete Daten zur Berechnung der verschiedenen Zerstörungsprozesse.*

Substanze	ρ_F (g cm^{-3})	A	α	P^{eq} (dyn cm^{-2})
CO	1.25	28.01	0.9	$P^{eq} = \exp(-\frac{1030}{T} + 27.37)$
H_2O	0.9	18	0.9	$P^{eq} = \exp(-\frac{6039}{T} + 30.86)$
Mg_2SiO_4	3.21	140.75	0.1	siehe [Duschl *et al.* 1995]
C	2.25	12.01	0.37 für C 0.34 für C_2 0.06 für C_3	siehe [Duschl *et al.* 1995] siehe [Duschl *et al.* 1995] siehe [Duschl *et al.* 1995]
FeS	4.83	87.91	0.1	siehe [Sharp & Huebner 1990] und Gl. (49)

4.5 Zusammenfassung

Zum Schluß fassen wir das verwendete Staubmodell zusammen. Der Staub besteht nur aus

- Graphit–Teilchen, die in eine Hülle von CO– und Wassereis eingebettet sind,
- Olivinteilchen (Mg_2SiO_4), ebenfalls in eine Hülle von CO– und Wassereis eingebettet,
- Troilitteilchen (FeS) mit einheitlichem Radius.

Die Größe dieser Teilchen, abgesehen vom Troilit, wird durch die Mathis–Rumpl–Nordsieck–Radiusverteilung gegeben. Diese Verteilung ist so berechnet, daß 70 % des verfügbaren Kohlenstoffs im Graphit gebunden ist. Die restlichen 30 % sind im CO (Eis) gebunden. Außerdem wird angenommen, daß das ganze Silizium im Silikatstaub und der ganze Schwefel im Troilitstaub gebunden ist. Die Häufigkeit des Schwefels ist gleich seiner kosmischen Häufigkeit. Der Sauerstoff, der nicht in Mg_2SiO_4 und in CO gebunden ist, ist als Wassereis anwesend (wie sicher diese Annahme ist, wird im Kap. 6.9 diskutiert).

5 Die Opazität

5.1 Die Opazität der Materie

Die Opazität gehört zu den wichtigsten Parametern der Astrophysik. Eine gute Kenntnis der Opazität eines Materials ist erforderlich, wenn der gesamte Energietransport radiativ erfolgt. Sie ist der Schlüsselparameter zur Bestimmung der thermischen Struktur zahlreicher astrophysikalischer Objekte, wie z.B. von Sternatmosphären oder Akkretionsscheiben.

In der Astrophysik wird oft eine über die verschiedenen Frequenzen gemittelte Opazität verwendet. In diesem Fall spricht man von einem „grauen“ Material, wenn bei der Berechnung des Strahlungstransports die verschiedenen Frequenzen außer Betracht gelassen werden. Wenn das Material optisch dick ist, ist es möglich, einen einfachen Ausdruck zwischen dem Energiefluß und dem Temperaturgradienten herzuleiten. Diese Näherung wird *Rosselandsche Näherung* genannt. Der Gesamtfluß ist dann (siehe auch (18))

$$F(z) = -\frac{16\sigma T^3}{3\tilde{\kappa}_R}\frac{\partial T}{\partial z}. \tag{83}$$

$\tilde{\kappa}_R$ ist der Rosselandsche mittlere Absorptionskoeffizient. Diese Gleichung wird manchmal *radiative Diffusionsgleichung* genannt. Man stellt fest, daß die Gleichung für den radiativen Energietransport ähnlich wie die Gleichung für den Wärmetransport aussieht. Der Faktor $-16\sigma T^3/3\tilde{\kappa}_R$ spielt die Rolle eines „Wärmeleitungskoeffizienten“. Für $\tilde{\kappa}_R$ haben wir

$$\frac{1}{\tilde{\kappa}_R} = \int_0^\infty \frac{1}{\tilde{\kappa}_\nu}\frac{\partial B_\nu}{\partial T}d\nu \Big/ \int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T}d\nu. \tag{84}$$

B_ν ist die Plancksche Funktion. Wenn wir mit (18) vergleichen, dann sehen wir, daß $\tilde{\kappa}_R = \rho\kappa_R$. κ_R wird manchmal *Massenabsorptionskoeffizient* gennant.

In unserem Modell besteht die Materie in der Scheibe aus vier Komponenten: dem Gas, dem Silikat–, dem Kohlenstoff– und dem Troilitstaub. Der Beitrag der verschiedenen Eissorten und des Troilits zur Absorption wird vernachlässigt. Wir nennen $\tilde{\kappa}_g$, $\tilde{\kappa}_s$ und $\tilde{\kappa}_c$ die mittleren Absorptionskoeffizienten für Gas, Silikat– und Kohlenstoffstaub. Intuitiv ist die mittlere Gesamtopazität des Materials gleich der Summe dieser drei Opazitäten:

$$\tilde{\kappa}_R = \tilde{\kappa}_g + \tilde{\kappa}_s + \tilde{\kappa}_c. \tag{85}$$

Eigentlich hätten wir aber

$$\frac{1}{\tilde{\kappa}_R} = \int_0^\infty \frac{1}{\tilde{\kappa}_{g,\nu} + \tilde{\kappa}_{s,\nu} + \tilde{\kappa}_{c,\nu}}\frac{\partial B_\nu}{\partial T}d\nu \Big/ \int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T}d\nu, \tag{86}$$

wobei $\tilde{\kappa}_{g,\nu}$, $\tilde{\kappa}_{s,\nu}$ und $\tilde{\kappa}_{c,\nu}$ die Absorptionskoeffizienten für Gas, Silikat und Kohlenstoff sind. Die einfache Summe (85) der einzelnen Opazitäten ist offensichtlich nur eine ungenaue Näherung des wahren Rosseland–Mittels, sollte aber für unser Problem ausreichend sein. Wenn wir die Massendichten ρ_g, ρ_s und ρ_c von Gas, Silikat und Kohlenstoff einführen, haben wir

$$\kappa_R = \frac{\rho_g}{\rho}\kappa_g + \frac{\rho_s}{\rho}\kappa_s + \frac{\rho_c}{\rho}\kappa_c. \tag{87}$$

ρ ist die Gesamtdichte: $\rho = \rho_g + \rho_s + \rho_c$. Man kann sich schnell davon überzeugen, daß $\rho_g \gg \rho_s + \rho_c$ gilt. Dann ist $\rho \approx \rho_g$ und

$$\kappa_R = \kappa_g + \frac{\rho_s}{\rho_g}\kappa_s + \frac{\rho_c}{\rho_g}\kappa_c \,. \tag{88}$$

Wie κ_s und κ_c bestimmt werden, werden wir im nächsten Abschnitt sehen. Für κ_g wird ein Wert von $0.01\,\mathrm{cm^2g^{-1}}$ angenommen. Das ist der Wert von κ_g bei $T \approx 2000\,\mathrm{K}$ und den in Frage kommenden Dichten im staubfreien Teil der Akkretionsscheibe [Alexander & Ferguson 1994].

5.2 Optische Eigenschaften der Staubteilchen

Das größte Problem bei Staubteilchen ist die Bestimmung ihrer Zusammensetzung und ihrer Größenverteilung. Dafür müssen wir in der Lage sein, die optischen Eigenschaften der Staubteilchen zu beschreiben. Das Problem ist in seinem Prinzip ganz einfach: wie modifizieren Staubteilchen die einfallende elektromagnetische Strahlung? Praktisch müssen wir die Maxwellschen Gleichungen im Staubmaterial mit den entsprechenden Randbedingungen an der Oberfläche bei gegebenem komplexen Brechungsindex $n + ik$ lösen (Mie–Theorie).

Es ist üblich, die Absorption und die Streuung durch Staubteilchen durch einen Parameter $Q_{\nu,ext}$ zu beschreiben: er beschreibt die Effizienz der Teilchen bei der Extinktion von Licht (Kap. 2.4.2). $\pi a^2 Q_{\nu,ext}$ ist der Wirkungsquerschnitt für die Extinktion. Eigentlich besteht $Q_{\nu,ext}$ aus zwei Termen, die die Effizienz der Staubteilchen bei der Streuung und Absorption von Licht beschreiben:

$$Q_{\nu,ext} = Q_{\nu,str} + Q_{\nu,abs} \,. \tag{89}$$

$Q_{\nu,str}$ und $Q_{\nu,abs}$ stehen dann im Mittelpunkt unseres Problems: Wenn wir sie bestimmen können, sind wir in der Lage, die Opazität zu bestimmen.

Betrachten wir die Streuung und die Absorption von Licht durch kleine Teilchen. „klein“ bedeutet, daß die Teilchen klein gegenüber der Wellenlänge der einfallenden Strahlung sind. Der Streuungs– und der Absorptionswirkungsquerschnitt sind [Landau & Lifshitz 1960]:

$$\sigma_{str} = \frac{8\pi}{3}\left|\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right|^2 a^2 x^4 \tag{90}$$

und

$$\sigma_{abs} = 12\pi x a^3 \frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1+2)^2+{\epsilon_2}^2} \,. \tag{91}$$

mit $x = 2\pi a/\lambda$. λ ist die Wellenlänge der einfallenden Strahlung und ϵ ist der komplexe Brechungsindex, dessen Real– bzw Imaginärteil ϵ_1 bzw ϵ_2 ist. Man hat somit

$$Q_{\nu,str} = \frac{\sigma_{str}}{\pi a^2} = \frac{8}{3}x^4 \frac{(\epsilon_1^2+\epsilon_2^2-\epsilon_2-2)^2+9\epsilon_2^2}{((\epsilon_1+2)^2+{\epsilon_2}^2)^2} \tag{92}$$

und

$$Q_{\nu,abs} = \frac{\sigma_{abs}}{\pi a^2} = 12 x a \frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1+2)^2+{\epsilon_2}^2} \,. \tag{93}$$

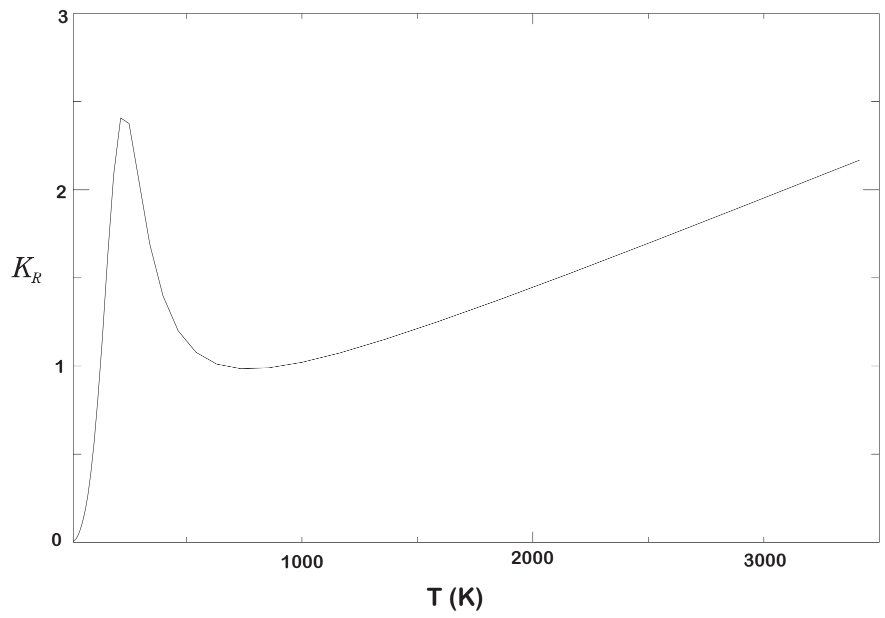

Abbildung 6: *Massenabsorptionskoeffizient für Silikatstaub.*

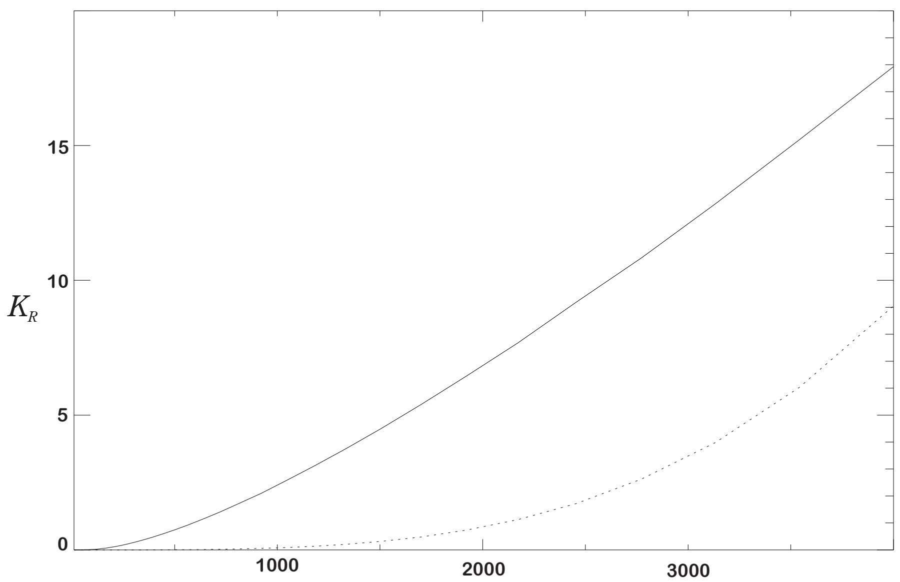

Abbildung 7: *Massenabsorptionskoeffizient (durchgezogene Linie) und Massenstreukoeffizient (gestrichelte Linie) für Kohlenstoffstaub.*

5.3 Die Massenabsorptionskoeffizienten

Seien $\tilde{\kappa}_{str,\nu}$ und $\tilde{\kappa}_{abs,\nu}$ die Massenabsorptionskoeffizienten der Staub–Gas–Mischung. Wir lassen die Indizes *str* und *abs* weg. Man hat

$$\kappa_\nu = \frac{\tilde{\kappa}_\nu}{\rho_g} = \frac{n_d \pi a^2 Q_\nu}{\rho_g}. \tag{94}$$

n_d ist die Anzahl der Staubteilchen pro cm^3. Wie wir gesehen haben (Kap. 5.1), ist die Gesamtdichte in guter Näherung gleich der Dichte des Gases. Wenn wir n_d mit der Masse m_d der Staubteilchen (in $1\,\mathrm{cm}^3$) multiplizieren, erhalten wir die Massendichte ρ_d des Staubs. Dann

$$\kappa_\nu = \frac{\rho_d \pi a^2 Q_\nu}{m_d \rho_g}. \tag{95}$$

Im allgemeinen haben wir

$$\rho_d = A_d m_{\mathrm{H}} \epsilon_{\mathrm{X}} N_{\mathrm{H}} f\,. \tag{96}$$

m_{H} ist die Masse des Wasserstoffatoms, A_d ist das Atomgewicht von Mg_2SiO_4 oder C, ϵ_{X} ist die Häufigkeit von Si oder C und f ist der Bruchteil von Si oder C, der im Staub gebunden ist. Im Falle des Silikats ist vor der Verdampfung f=1 und im Falle der Graphitteilchen, da nur 70% des verfügbaren Kohlenstoffes im Staub gebunden ist [Mathis *et al.* 1977], ist f=0.7.

Die Dichte des Gases ist näherungsweise

$$\rho_g = (1 + 4\epsilon_{\mathrm{He}}) m_{\mathrm{H}} N_{\mathrm{H}} = 1.4 m_{\mathrm{H}} N_{\mathrm{H}} \tag{97}$$

mit $\epsilon_{\mathrm{He}} = 0.1$. Der Anteil der schweren Elemente wurde hier vernachlässigt. Wir haben somit

$$\kappa_\nu = \frac{A_d \epsilon_{\mathrm{X}} f \pi a^2 Q_\nu}{1.4 m_d}. \tag{98}$$

Da die Teilchen als sphärisch angenommen werden, gilt

$$m_d = \frac{4\pi}{3} a^3 \rho_F\,, \tag{99}$$

wobei ρ_F die Dichte des Festkörpers (Olivin oder Graphit) ist (siehe Tab. 2). Dann haben wir

$$\kappa_\nu = \frac{3}{4} \frac{A_d \epsilon_{\mathrm{X}} Q_\nu f}{1.4 a \rho_F}. \tag{100}$$

Q_ν steht in der obigen Gleichung für $Q_{\nu,ext}$. Wenn wir die Indizes *ext*, *abs* und *str* einführen, erhalten wir

$$\frac{Q_{\nu,ext}}{a} = \frac{Q_{\nu,abs}}{a} + \frac{Q_{\nu,str}}{a} = \frac{8\pi}{\lambda} \frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1 + 2)^2 + {\epsilon_2}^2} + \frac{8}{3} \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4 a^3 \left|\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2}\right|. \tag{101}$$

Wir bemerken, daß in der Näherung kleiner Teilchen $Q_{\nu,abs}/a$ *unabhängig* vom Radius ist. Außerdem werden wir sehen, daß die Streuung vernachlässigbar gegenüber der wahren Absorption ist. Nur die wahre Absorption trägt zur Opazität bei. Diese Eigenschaft erlaubt eine einfache Berechnung der Opazität, da die Änderung von a^3 (wegen Verdampfung) im

Streuterm außer Acht gelassen werden kann.

Der Massenabsorptionskoeffizient (eigentlich der Massen*extinktion*skoeffizient) ist somit

$$\kappa_\nu = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{Si}}}{1.4\rho_F}\frac{8\pi}{\lambda}\frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1+2)^2+{\epsilon_2}^2} \tag{102}$$

für Silikat und

$$\kappa_\nu = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{C}}0.7}{1.4\rho_F}\frac{8\pi}{\lambda}\frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1+2)^2+{\epsilon_2}^2} \tag{103}$$

für Graphit. κ_ν wurde mit den von Draine (1985) bestimmten dielektrischen Konstanten für Silikat und Graphit berechnet. Die Rosselandsche Mittelung von κ_ν liefert dann den Massenabsorptionskoeffizienten.

Wenn wir das Rosseland–Mittel κ_{str} und κ_{abs} für Graphit und Silikat als Funktion der Temperatur darstellen wollen, muß die Größenverteilung der Staubteilchen berücksichtigt werden. κ_{abs} ist radiusunabhängig und bleibt unverändert. κ_{str} enthält für einheitliche Staubteilchen den Term a^3 und muß, falls ein Radiusspektrum endlicher Breite vorhanden ist, gemittelt werden. Diese Mittelung erlaubt die Bestimmung einer Größenordnung für $\kappa_{\nu,str}$. Da $\sigma_{\nu,str} \sim \pi a^2 Q_{\nu,str}$ (90) und $Q_{\nu,str} \sim a^4$ (92) hat man eine a^6–Abhängigkeit an dieser Stelle. $\kappa_{str} \sim \sigma_{\nu,str}/\rho_F$, d.h. es tritt an dieser Stelle ein Faktor a^3 auf (99). Die korrekte Mittelung ist dann

$$\kappa_{\nu,str} = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{X}}f}{1.4\rho_F}\frac{8}{3}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4\left|\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right|\frac{<a^6>}{<a^3>}. \tag{104}$$

Da $<a^6>= K_6/K_0$ und $<a^3>= K_3/K_0$ (53) hat man

$$\kappa_{\nu,str} = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{X}}f}{1.4\rho_F}\frac{8}{3}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4\left|\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right|\frac{K_6}{K_3}. \tag{105}$$

Da $K_6 = \frac{2}{7}(a_+^{3.5} - a_-^{3.5})$ und $K_3 = 2(a_+^{0.5} - a_-^{0.5})$ hat man

$$\frac{K_6}{K_3} = \frac{1}{7}\frac{a_+^{3.5} - a_-^{3.5}}{a_+^{0.5} - a_-^{0.5}} \approx \frac{1}{7}a_+^3. \tag{106}$$

Dann haben wir

$$\kappa_{\nu,str} = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{Si}}}{1.4\rho_F}\frac{8}{3}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4\left|\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right|\frac{1}{7}a_+^3 \tag{107}$$

für Silikat und

$$\kappa_{\nu,str} = \frac{3}{4}\frac{A_d\epsilon_{\mathrm{C}}0.7}{1.4\rho_F}\frac{8}{3}\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^4\left|\frac{\epsilon-1}{\epsilon+2}\right|\frac{1}{7}a_+^3 \tag{108}$$

für Graphit.

Die Integration (84) wird durchgeführt und wir erhalten für einen breiten Temperaturbereich die Rosseland–Opazitäten für Silikat und Kohlenstoff. Die Abb. 6 und 7 zeigen den Massenabsorptionskoeffizienten (durchgezogene Linie) und den Massenstreukoeffizienten (gestrichelte Linie) für Silikat– und Kohlenstoffteilchen. Der Massenstreukoeffizient ist im Falle der Silikatteilchen zu klein, um in der Abb. 6 bei dem gewählten Maßstab erkennbar zu sein. Die Streuung durch Graphitteilchen kann ebenfalls in guter Näherung gegenüber der Absorption vernachlässigt werden.

6 Chemie in einer protoplanetaren Akkretionsscheibe

In diesem Teil wollen wir die verschiedenen chemischen Prozesse behandeln, die im Rahmen unseres Modells in der Gasphase in einer protoplanetaren Akkretionsscheibe ablaufen, und die Methode zur Berechnung der chemischen Zusammensetzung der Gasphase vorstellen. Wir haben schon erwähnt, daß die chemischen Prozesse in manchen kosmischen Objekten aufgrund der niedrigen Temperaturen und Dichten weit entfernt vom thermodynamischen Gleichgewicht ablaufen, im Gegensatz zur Chemie in den Sternatmosphären, in denen die verschiedenen Spezies sich wegen der hohen Temperatur und Dichte untereinander im thermischen Gleichgewicht befinden. In einer protoplanetaren Akkretionsscheibe sind ebenfalls die Dichten und Temperaturen so gering, daß kein thermodynamisches Gleichgewicht zu erwarten ist, vielleicht abgesehen von dem Zentralgebiet in der Nähe des Protosterns, wo die Temperatur und die Dichte etwa denen einer kühlen Sternatmosphäre entsprechen. Nur hier könnte ein chemisches Gleichgewicht zwischen den verschiedenen Spezies erreicht werden [Duschl *et al.* 1995]. Auf jeden Fall werden wir bei der Berechnung der chemischen Zusammensetzung der Materie in der Akkretionsscheibe explizit die ganze Kinetik der Molekül– und Ionenbildung berücksichtigen. Sie kann sehr komplex sein, und soviele Reaktionspfade wie möglich müssen in der numerischen Simulation einer Nichtgleichgewichtschemie betrachtet werden.

6.1 Ist die Ionisation in der Akkretionsscheibe wichtig ?

In den Molekülwolken und den Sternentstehungsgebieten sind die wichtigsten Reaktionen zweifellos die Reaktionen zwischen Ionen und neutralen Teilchen.

Die Hauptionisationsquellen in Molekülbildungsgebieten sind einerseits die kosmische Strahlung und andererseits, falls sie nicht durch Absorption durch den Staub abgeschirmt ist, die UV–Strahlung von Sternen. Die kosmische Strahlung besteht überwiegend aus positiv geladenen Teilchen wie z.B. Protonen, α–Teilchen (Heliumkerne) und Atomkernen. Die Teilchen haben Energien von 10^8 bis 10^{20} eV! Beim Durchgang der Materie ionisieren die Teilchen der kosmischen Strahlung Atome und Moleküle durch Stoßionisation. Die häufigsten Spezies im Kosmos sind H_2, H und He und bei deren Ionisation werden die Ionen H_2^+, H^+ und He^+ erzeugt. Die Folgereaktionen mit diesen Ionen spielen eine zentrale Rolle in der kosmischen Chemie.

Dank ihrer außerordentlich hohen Energie, kann die kosmische Strahlung sehr tief in die Materie eindringen. Dolginov & Stepinski (1994) haben die Eindringtiefe der kosmischen Strahlung in eine protoplanetare Akkretionsscheibe untersucht. Sie fanden, daß die kosmische Strahlung nur in der Nähe des Zentralsterns (s <1 AE) einen erheblichen Einfluß auf den Ionisationsgrad der Materie hat. In dem restlichen Teil der Scheibe ist die resultierende Ionisation am äußeren Rand der Scheibe stark genug, um die Existenz eines magnetohydrodynamischen Dynamos und eines daraus resultierenden Magnetfeldes zu erlauben. Die Teilchen der kosmischen Strahlung spiralen entlang der Magnetfeldlinien. Da diese Feldlinien inhomogen und unregelmäßig orientiert sind, bewegen sich die Teilchen in einer Art „random walk“ in der Scheibe. Die einfallenden Teilchen werden dadurch gestreut, werden bereits in den äußeren Schichten der Scheibe abgeschirmt und sind für die Ionisation in tiefen Schichten verloren. Der Ionisationsgrad der Materie wird dadurch im Scheibeninneren gegenüber den Randbereichen vermindert. Die kosmische Strahlung wirkt also auf das Magnetfeld zurück und kann sich selbst „abschirmen“. Abb. 8 zeigt die Eindringtiefe d der kosmischen Strahlung als Bruchteil der Scheibenhöhe H mit und ohne

Magnetfeld.

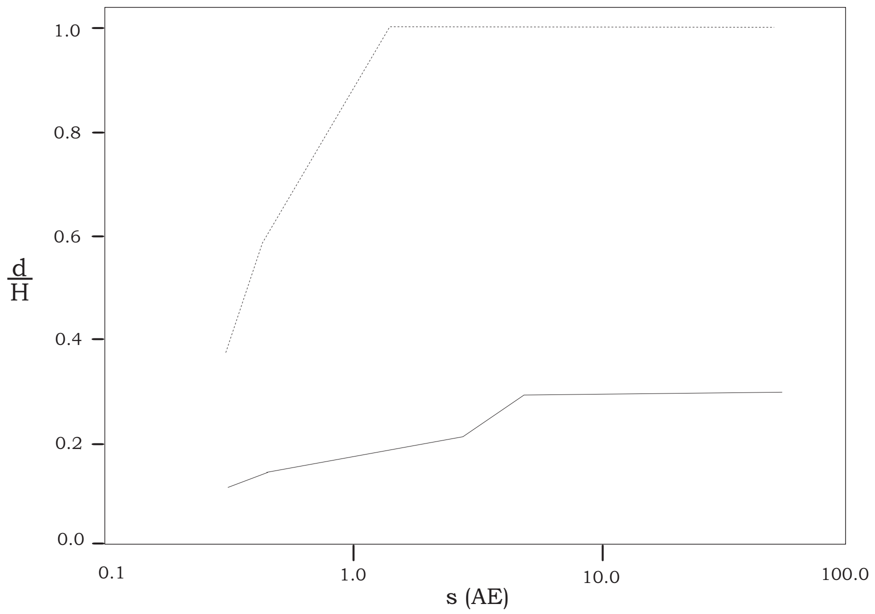

Abbildung 8: *Eindringtiefe d der kosmischen Strahlung in der Akkretionsscheibe als Funktion des radialen Abstandes. H ist die Scheibenhöhe. Die durchgezogene (bzw. gestrichelte) Linie zeigt die Eindringtiefe mit (bzw. ohne) Magnetfeld (Dolginov & Stepinski 1994).*

Ohne Magnetfeld hat man $d/H \approx 1$, d.h. die kosmische Strahlung kann problemlos die ganze Materie ionisieren. Auf der anderen Seite behindert ein Magnetfeld die kosmische Strahlung: die Eindringtiefe erreicht in der ganzen Scheibe etwa 20% der Scheibendicke. Die Zentralebene der Scheibe ist dann nicht ionisiert. Wir nehmen in dieser Modellrechnung an, daß in der Scheibe kein Magnetfeld vorhanden ist und, daß die kosmische Strahlung deswegen problemlos in die Scheibe eindringen kann.

In unserer Scheibe gibt es keine UV–Strahlung. Die einzige mögliche UV–Quelle wäre der Zentralstern, aber seine Wirkung kann außer Acht gelassen werden, da die Akkretionsscheibe in radialer Richtung optisch dick ist und die UV–Photonen die Materie radial nicht durchdringen können (abgesehen vielleicht von der Zentralregion in der Nähe der Grenzschicht zwischen Scheibe und Protostern, aber dieser Teil der Scheibe wird nicht betrachtet).

Eine dritte Ionisationsmöglichkeit ist eine Ionisation durch Zerfall langlebiger radioaktiver Kerne, wie Al^{26} oder I^{129}, die in der frühen Phase unseres Sonnensystems anwesend waren [Wasserburg 1985]. Die Zerfallsprodukte von Al^{26} bzw. I^{129} sind Mg^{26} bzw. Xe^{129}. Die Existenz von Al^{26} und I^{129} in den frühen Phasen des Sonnensystems wurde durch die Entdeckung der Zerfallsprodukte in Meteoriten bestätigt. Die Häufigkeit der Zerfallsprodukte von Al^{26} und I^{129} ist erheblich höher als die typischen Werte für diese Isotope, die man in terrestrischen Materialien beobachten kann. Andere radioaktive Elemente wie z.B. Ca^{41} haben ebenfalls existiert. Die Effizienz der Ionisation wird durch zwei Parameter festgelegt: die Häufigkeit der radioaktiven Spezies relativ zu den Wasserstoffkernen und die mittlere Lebensdauer der radioaktiven Kerne. Damit die Ionisation effizient ist, sollte die mittlere

Lebensdauer der Kerne nicht wesentlich länger oder wesentlich kürzer als die Lebensdauer der protoplanetaren Scheibe und die Häufigkeit relativ zu den Wasserstoffkernen hoch sein. Al^{26} scheint der beste Kandidat zu sein. Die mittlere Lebenszeit von Al^{26} beträgt $1.1 \cdot 10^6$ Jahre und die Ionisationsrate von H_2 bzw. He durch den Zerfall von Al^{26} ist $6.1 \cdot 10^{-18}\,s^{-1}$ bzw. $5.2 \cdot 10^{-18}\,s^{-1}$ [Umebayashi & Nakano 1981]. Dieser Wert ist nur wenig niedriger als der kanonische Wert von $1.5 \cdot 10^{-17}\,s^{-1}$ für die Ionisation durch kosmische Strahlung. Die anderen radioaktiven Kerne haben alle entweder eine größere Lebensdauer ($2.3 \cdot 10^7$ Jahre für I^{129}) und/oder hatten eine zu geringe Häufigkeit in der Scheibe (für I^{129} erhält man beispielsweise eine sehr kleine Ionisationsrate von $\approx 10^{-26}\,s^{-1}$).

Al^{26}–Kerne zerfallen in Mg^{26}–Kerne hauptsächlich unter Aussendung eines Positrons (β^+–Zerfall – ein Proton im Kern verwandelt sich in ein Neutron). Das emittierte Positron kann ein beliebiges Atom oder Molekül X nach dem folgenden Schema ionisieren:

$$\mathrm{X} + \mathrm{e}^+ \longrightarrow \mathrm{X}^+ + \mathrm{e}^- + \mathrm{e}^+$$

und schließlich annihiliert das Positron zusammen mit einem Elektron in zwei γ–Quanten

$$\mathrm{e}^- + \mathrm{e}^+ \longrightarrow 2\gamma\,.$$

Die γ–Quanten können dann nach dem folgenden Schema weitere Atome ionisieren:

$$\mathrm{X} + \gamma \longrightarrow \mathrm{X}^+ + \mathrm{e}^-\,.$$

Wie schon erwähnt, berücksichtigen wir nur die Ionisation von H_2 und He, weil diese die häufigsten Spezies bei normaler kosmischer Häufigkeit sind.

6.2 Neutrale Austauschreaktionen

Neutrale Teilchen (Atome oder Moleküle) reagieren oft nach dem Schema (*Austauschreaktion*):

$$\mathrm{A} + \mathrm{BC} \longrightarrow \mathrm{AB} + \mathrm{C}$$

Der Wirkungsquerschnitt einer solchen Reaktion beträgt meistens etwa $10^{-15}\,cm^2$ und die relativen Geschwindigkeiten der Reaktionspartner sind von der Größenordnung $10^4 - 10^6\,cm\,s^{-1}$. Das Produkt dieser beiden Werte liefert als Größenordnung für den Ratenkoeffizienten $k \leq 10^{-11}\,cm^3\,s^{-1}$. Der Ratenkoeffizient dieser Austauschreaktion ist manchmal stark temperaturabhängig. Diese Abhängigkeit ist für die interstellare Chemie durchaus wichtig, da die Temperatur in kosmischen Objekten sehr stark variieren und vor allem sehr niedrig werden kann. Die Reaktionen werden dann oft sehr langsam. Viele Reaktionen dieser Art sind aber weder experimentell noch theoretisch untersucht worden und ihre Temperaturabhängigkeit ist nicht genau bekannt.

Die Reaktionsrate einer Austauschreaktion wird üblicherweise durch das empirische *Arrhenius–Gesetz* beschrieben:

$$k = k_0 T^\alpha \exp\Big(-\frac{E_a}{kT}\Big). \tag{109}$$

k_0 ist der Frequenzfaktor, α ist eine Konstante (sie müssen beide für jede chemische Reaktion bestimmt werden) und k ist die Boltzmann–Konstante.

Damit eine Austauschreaktion ablaufen kann, müssen sich die Atome und Moleküle neu arrangieren. Die Reaktion läuft dann über einen Zwischenzustand (ABC)*, in dem die reagierenden Spezies intim untereinander „gemischt“ sind. Dazu müssen in den meisten Fällen chemische Bindungen aufgebrochen werden und für diesen Prozeß ist deswegen die Überwindung einer zusätzlichen Energiebarriere nötig, die sog. *Aktivierungsenergie* E_a. Die Moleküle müssen durch thermische Stöße den entsprechenden Energiebetrag auf sich versammeln, damit sie ihre Bindungen aufbrechen können. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Stoßpartner zufällig durch thermische Stöße die Energie E_a auf sich versammelt haben, ist im thermischen Gleichgewicht proportional zu $\exp(-E_a/kT)$, sodaß die Reaktionsrate k proportional zu dieser Wahrscheinlichkeit ist. Wenn $T > E_a/k$ ist, spielt die Exponentialfunktion im Ratenkoeffizienten k keine große Rolle. Im entgegengesetzten Fall, wenn $T < E_a/k$ ist, kann ihr Einfluß entscheidend sein.

Die Temperatur variiert in einer protoplanetaren Akkretionsscheibe drastisch. Sie beträgt einige K am Außenrand und über 5000 K in der Nähe des Protosterns. Die chemischen Prozesse werden dadurch stark vom Temperaturverlauf in der Scheibe beeinflußt.

6.3 Rückwärtsraten

Für jede chemische Reaktion gilt im thermodynamischen Gleichgewicht das bekannte *Massenwirkungsgesetz*. Im Falle der obigen Austauschreaktion, nimmt dieses Gesetz die einfache Gestalt

$$\exp\Big(\frac{\Delta G}{RT}\Big) = \frac{P_\mathrm{A} P_\mathrm{BC}}{P_\mathrm{AB} P_\mathrm{C}} \tag{110}$$

an, wobei $\Delta G = G_\mathrm{AB} + G_\mathrm{C} - G_\mathrm{A} - G_\mathrm{BC}$ ist, d.h. die freie Enthalpiedifferenz zwischen den End– und den Ausgangsprodukten. $P_{\ldots}$ sind die Partialdrucke der Reaktionspartner. Wenn die freien Enthalpiedifferenzen der Reaktionspartner bekannt sind, können die Gleichgewichtskonzentrationen berechnet werden und daraus der Rückwärtsratenkoeffizient der Reaktion aus dem Vorwärtsratenkoeffizienten. Wenn die Hinrate k_f und die freien Enthalpiedifferenzen bekannt sind, erhält man die Rückrate k_r mit der einfachen Beziehung:

$$k_r = k_f \frac{n_\mathrm{A} n_\mathrm{BC}}{n_\mathrm{AB} n_\mathrm{C}} \tag{111}$$

d.h.

$$k_r = k_f \frac{P_\mathrm{A} P_\mathrm{BC}}{P_\mathrm{AB} P_\mathrm{C}} = k_f \exp\Big(\frac{\Delta G}{RT}\Big)\,, \tag{112}$$

da man im thermodynamischen Gleichgewicht

$$k_f n_\mathrm{A} n_\mathrm{BC} = k_r n_\mathrm{AB} n_\mathrm{C} \tag{113}$$

hat.

6.4 Ionenmolekülreaktionen

Als *Ionenmolekülreaktion* bezeichnet man eine Reaktion der Form

$$\mathrm{A}^+ + \mathrm{BC} \longrightarrow \mathrm{AB}^+ + \mathrm{C}\,.$$

Benötigt wird der Ratenkoeffizient k ($\mathrm{cm^3\,s^{-1}}$) und seine eventuelle Temperaturabhängigkeit. Ein typischer Wert für k ist $k \approx 10^{-9}\,\mathrm{cm^3\,s^{-1}}$.

Für Ionenmolekülreaktionen kann eine klassische Rechnung zur Bestimmung von k duchgeführt werden. Untersucht wird in diesem Fall der Stoß zwischen einem Ion und einem neutralen Molekül. Eine Reaktion findet nur dann statt, wenn der Stoßparameter einen kritischen Wert unterschreitet. Der so berechnete Ratenkoeffizient (auch Langevin–Koeffizient genannt) liefert für einige Reaktionen gute Ergebnisse, ist aber in der Regel nicht zuverlässig. Eine quantenmechanische Behandlung ist in manchen Fällen unvermeidlich. Ionenmolekülreaktionen zeigen praktisch keine Abhängigkeit des Ratenkoeffizienten von der Temperatur. Sie bleiben deswegen auch bis zu sehr tiefen Temperaturen wirksam.

6.5 Ladungsaustauschreaktionen

Reaktionen der Art

$$\mathrm{A^+ + B \longrightarrow A + B^+}$$

sind für die Astrochemie sehr wichtig. Eine wichtige Startreaktion für die Sauerstoffchemie im Kosmos ist z.B.

$$\mathrm{H^+ + O \longleftrightarrow H + O^+}\,.$$

Da H_2 das häufigste Molekül ist, reagiert O^+ im wesentlichen mit diesem Molekül nach dem Schema

$$\mathrm{O^+ + H_2 \longrightarrow H + OH^+}\,.$$

OH^+ reagiert dann weiter mit H_2 und bildet H_2O^+. Diese Ionen können mit freien Elektronen rekombinieren und erzeugen die wichtigen Moleküle OH und H_2O. Die obige Ladungsaustauschreaktion stellt den Einstieg in die Sauerstoffchemie dar.

6.6 Dissoziative Rekombination

Dissoziative Rekombination ist ein Prozeß, bei dem positive Ionenmoleküle mit Elektronen rekombinieren, bei dem aber die Reaktionsenergie nicht zur Emission eines Photons führt, sondern zur Dissoziation des gebildeten Moleküls in neutrale Produkte:

$$\mathrm{AB^+ + e^- \longrightarrow A + B}\,.$$

Theorie und Messungen haben gezeigt, daß der Ratenkoeffizient ziemlich groß ist. Er kann Werte von 10^{-7}–$10^{-6}\,\mathrm{cm^3 s^{-1}}$ annehmen. Die Temperaturabhängigkeit ist etwa $T^{-\frac{1}{2}}$. Die Rate nimmt dann mit abnehmender Temperatur zu und der Prozeß bleibt auch bei tiefen Temperaturen wirksam.

6.7 Ratengleichungen

In unserem Modell wird die Gasphasenchemie von Zweiteilchen– und Dreiteilchenstößen zwischen neutralen Spezies (Atomen oder Molekülen) und Ionen bestimmt. In der Regel sind Dreiteilchenstöße in der Astrochemie aufgrund der geringen Dichten unwichtig. Im Fall der protoplanetaren Akkretionsscheiben müssen wir sie aber wenigstens bei den häufigen Spezies H_2 und H berücksichtigen. Wir erwarten, daß solche Reaktionen besonders in der Nähe des Zentralsterns (also für $s < 1\,\mathrm{AE}$) wirksam sind, da die Teilchendichte dort hoch ist.

Sie n_i die Teilchendichte einer Spezies i (die Anzahl der Atome oder Moleküle in einer Volumeneinheit). Die Grundgleichung, die die Entwicklung dieser Dichte n_i in der Zeit beschreibt, ist die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (n_i \mathbf{v}) = 0\,. \tag{114}$$

$\mathbf{v}$ ist die Gasgeschwindigkeit. Wir haben hier noch keine Quellterme (Beitrag der chemischen Gleichungen zur Teilchendichte) berücksichtigt. Wie in Kap. 3 erwähnt, verwenden wir ein zylindrisches Koordinatensystem $(s\,,z)$ (es gibt wegen der Rotationssymmetrie keine ϕ–Abhängigkeit). Wir haben somit

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{1}{s}\frac{\partial}{\partial s}(s n_i v_s) + \frac{\partial}{\partial z}(n_i v_z) = 0\,. \tag{115}$$

Entlang einer Stromlinie haben wir

$$\frac{dn_i}{dt} = v_s \frac{\partial n_i}{\partial s} + v_z \frac{\partial n_i}{\partial z} + \frac{\partial n_i}{\partial t}\,. \tag{116}$$

Mit der Kontinuitätsgleichung (114) erhalten wir die zeitliche Entwicklung von n_i in einem mitbewegten Bezugssystem

$$\frac{dn_i}{dt} = -n_i \left(\frac{v_s}{s} + \frac{\partial v_s}{\partial s} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right). \tag{117}$$

In dieser Gleichung ist v_s bekannt ((37) oder (44)). In der 1–Zonen–Näherung gilt für die vertikale Geschwindigkeit v_z

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} \approx \frac{v_z}{H}\,. \tag{118}$$

Außerdem gilt

$$v_z = \frac{dH}{dt} = \frac{dH}{ds}\frac{ds}{dt} = \frac{dH}{ds} v_s\,, \tag{119}$$

sodaß die Kontinuitätsgleichung die einfache Gestalt annimmt:

$$\frac{dn_i}{dt} = -n_i \left(\frac{v_s}{s} + \frac{\partial v_s}{\partial s} + \frac{1}{H}\frac{dH}{ds} \right). \tag{120}$$

Zusätzlich ändern sich ständig die Teilchendichten n_i aufgrund der chemischen Entwicklung der Materie. Wir müssen dann zu (120) die entsprechenden Quellterme addieren. Betrachten wir als Beispiel die folgende allgemeine chemische Reaktion:

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k} \mathrm{C} + \mathrm{D}\,. \tag{121}$$

Sie ist charakterisiert durch den Ratenkoeffizienten k. Die Änderung dn_{A}/dt bzw. dn_{B}/dt ist gegeben durch

$$\frac{dn_{\mathrm{A}}}{dt} = \frac{dn_{\mathrm{B}}}{dt} = -k n_{\mathrm{A}} n_{\mathrm{B}}\,. \tag{122}$$

Das Minuszeichen rührt daher, daß A bzw. B vernichtet wird, wenn die Reaktion von links nach rechts verläuft. Umgekehrt wird durch die obige Reaktion C bzw. D gebildet. Es gilt somit

$$\frac{dn_{\mathrm{C}}}{dt} = \frac{dn_{\mathrm{D}}}{dt} = kn_{\mathrm{A}}n_{\mathrm{B}} \,. \tag{123}$$

Diese beiden Gleichungen sind dann Quellterme für (120), die auf der rechten Seite addiert werden müssen. Im allgemeinen Fall haben wir nach Addition dieser Quellterme:

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} &= -n_i\left(\frac{v_s}{s} + \frac{\partial v_s}{\partial s} + \frac{1}{H}\frac{dH}{ds}\right) \\ &\quad -n_i \sum_j k_{ij} \cdot n_j + \sum_{jl} k_{jl} \cdot n_j \cdot n_l \\ &\quad -n_i \sum_{jl} k_{ijl} \cdot n_j \cdot n_l + \sum_{jlm} k_{jlm} \cdot n_j \cdot n_l \cdot n_m \,. \end{aligned} \tag{124}$$

Der zweite Term auf der rechten Seite beschreibt den Verlust von i aufgrund von Reaktionen zwischen i und j. Der dritte Term stellt den Gewinn an i durch Reaktionen zwischen j und l dar. Der vierte (bzw. fünfte) Term beschreibt den Verlust (bzw. Gewinn) der Spezies i aufgrund von Dreiteilchenstößen. Die Koeffizienten k_{ij}, k_{jl}, k_{ijl} und k_{jlm} sind die Ratenkoeffizienten der entsprechenden Reaktionen. Als Quellterme haben wir zusätzlich noch die Beiträge der Sublimationsprozesse (69).

Die in dieser Arbeit verwendeten chemischen Reaktionen sind die neutralen Reaktionen von Mitchell (1984). Einige Ratenkoeffizienten sind durch neuere Daten von Baulch *et al.* (1992) ersetzt worden und einige Reaktionen, die sich nicht in Mitchell (1984) befinden, sind hinzugefügt worden. Außerdem konnten wir manche in Mitchell (1984) nicht enthaltene Rückwärtsratenkoeffizienten bestimmen, da die Gleichgewichtskonstanten in Baulch *et al.* (1992) angegeben sind. Die Rückwärtsreaktionen, die aus energetischen Gründen nicht möglich sind, sind außer Acht gelassen worden. Die Ionenreaktionen, ein Teil der Silikat–Chemie und die Schwefel–Chemie befinden sich in Millar *et al.* (1991). Es wurde die neueste Version, die über WWW verbreitet wird, verwendet. Die Si–Chemie wurde ergänzt durch die Reaktionen in Britten *et al.* (1990).

In der vorliegenden Arbeit berücksichtigen wir 147 Spezies (Atome, Moleküle, Ionen und Elektronen – Tab. 3 und Tab. 4) der Elemente H, C, N, O, Si, S und insgesamt 151 Differentialgleichungen: eine Gleichung steht für den Radius der Silikatteilchen (mit und ohne Eisschicht), eine Gleichung für den Radius der Graphitteilchen (ebenfalls mit und ohne Eisschicht) und eine Gleichung für den Radius der Troilitteilchen. Dazu kommt noch eine algebraische Gleichung für die Temperatur. Das Ratengleichungssystem berücksichtigt über 1200 chemische Reaktionen, die zusammen mit ihren Ratenkoeffizienten im Anhang A aufgelistet sind. Eisen und Magnesium sind im interstellaren Medium zusammen mit ihren Ionen Mg^+ und Fe^+ fast nur an Ladungsaustauschreaktionen beteiligt. Diese Reaktionen sollten keine große Wirkung auf die ganze Chemie haben und werden beiseite gelassen.

6.8 Bestimmung der Temperatur

Wir haben keine analytische Beziehung zwischen den Rosseland–Mitteln der Massenabsorptionskoeffizienten von Graphit und Silikat und der Temperatur. Um eine solche Beziehung zu bekommen, müssen die Kurven in Abb. 6 und 7 interpoliert werden. Eine Interpolation der Kurve in Abb. 7 ist aufgrund des einfachen Verlaufes nicht problematisch. Für die Kurve in Abb. 6 verwenden wir die folgende Funktion:

Tabelle 3: **Berücksichtigte Atome und Moleküle**

Anzahl der Atome							
1	2	3	4	5	6	7	$\geq$8
H	H_2	H_2O	H_2O_2	CH_4	C_2H_4	C_2H_5	C_6H_2
C	O_2	HO_2	NH_3	C_2H_3	C_4H_2	C_4H_3	C_2H_6
O	OH	NH_2	CH_3	C_3H_2	CH_3O_2	CH_3OOH	C_2H_5OOH
N	NH	HCN	C_2H_2	C_4H	CH_2CHO	CH_3CHO	C_2H_5OO
Mg	CN	CH_2	H_2CO	H_3CO	CH_3CO	C_2H_4O	C_6H_5
Si	CH	HCO	CHCO	CH_2CO	CH_2OOH	SiH_3O_2H	C_6H_5OH
He	C_2	NO_2	HNCO	HCCOH	CH_3OO		$C_6H_5CH_2$
S	NO	N_2O	C_2HO	CH_2OH	SiH_3OH		C_2H_4OOH
Fe	N_2	HNO	HCHO	HCO_3	SiH_3O_2		C_6H_5O
	CO	OCN	SiH_3	SiH_4			$C_6H_5CH_3$
	SiO	CO_2	SiH_2O	SiH_3O			$C_6H_5C_2H_4$
	SiH	C_2H	SiOOH	SiH_2OH			$C_6H_5C_2H_5$
	SiC	C_2O		HSiOOH			C_6H_4OH
	HS	N_2H					C_2H_5O
	CS	CHO					C_6H_6
	SO	SiH_2					C_6H_5CHO
		SiO_2					$C_6H_4C_2H_5$
		HSiO					
		HCS					
		OCS					
		H_2S					
		SO_2					

$$\kappa_R = \left[1 + a\exp\left(-\frac{(T_c - b)^2}{c^2}\right)\right]\exp\left(d\log(T_c) + \sum_{i=1}^{9} a_i {T_c}^{i-3}\right) . \tag{125}$$

Die Koeffizienten d und a_i werden mit einer Methode der kleinsten Quadrate bestimmt. Die Gauß–Funktion als Multiplikationsfaktor sorgt mit geeigneten Parametern a, b und c für eine gute Interpolation des Peaks.

Die Temperatur in der Zentralebene T_c und der Massenabsorptionskoeffizient κ_R sind durch (41) und (125) gekoppelt. Sie müssen Lösungen der beiden Gleichungen sein. Wir definieren eine Funktion F als

$$F \equiv T_c - 997 s^{-\frac{9}{10}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{4}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{4}}{\kappa_R}^{\frac{1}{4}} . \tag{126}$$

T_c ist in unserem Problem eine zusätzliche Variable. T_c und κ_R sind dann bestimmt, wenn F=0 ist. Die Bestimmung der Nullstelle von F erfolgt durch ein Newton–Raphson–Verfahren. Bei jedem Integrationsschritt werden T_c und κ_R bestimmt.

6.9 Wie wird die chemische Zusammensetzung der Materie bestimmt?

Wir haben schon (Kap. 3.9) das Prinzip der Bestimmung der chemischen Zusammensetzung der Materie erwähnt. Wir wollen jetzt die Methode genau erklären.

Tabelle 4: **Berücksichtigte Ionen**

		Anzahl der Atome			
1	2	3	4	5	6
H^+	H_2^+	H_2O^+	CH_3^+	CH_4^+	CH_5^+
C^+	CO^+	CH_2^+	NH_3^+	NH_4^+	
O^+	OH^+	NH_2^+	H_3O^+		
N^+	NH^+	HCN^+			
He^+	CH^+	HCO^+			
H^-	SiH^+	H_3^+			
C^-	SiC^+	SiH_2^+			
Si^+	SiO^+	HCS^+			
S^+	SH^+	H_2S^+			
	CS^+				
	SO^+				

Tabelle 5: *Verwendete Parameter für die Berechnung der Scheibenstruktur.*

Radius s_0 der Akkretionsscheibe	40 AE
Zentralmasse M	$1\,M_\odot$
Massenflußrate $\dot{M}$	$10^{-7}M_\odot$/Jahr
Flächendichte Σ	$2500\,\mathrm{g\,cm^{-2}}$ für s=1 AE

6.9.1 Das Scheibenmodell

Zuerst müssen wir die protoplanetare Scheibe modellieren. In der Tab. 5 sind die Modellparameter unserer Akkretionsscheibe zusammengefaßt. Für die Wahl eines Außenradius müssen wir einen Punkt beachten: Die gesamte akkretierende Masse vom Außenrand bis zum Zentralstern darf nicht zu groß sein, da wir eine *konstante* Zentralmasse angenommen haben. Mit der in Tab. 5 angegebenen Massenflußrate wollen wir die gesamte akkretierende Masse berechnen. Wenn wir in (45) s gleich null setzen, ist t die Zeit, die ein Gaspaket braucht, um von s_0=40 AE (Außenrand) auf den Zentralstern zu akkretieren. Diese Zeit beträgt etwa $3\cdot 10^6$ Jahre. Dies entspricht einer Masse von $10^{-7}M_\odot/\mathrm{Jahr}\cdot 3\cdot 10^6 = 0.3\,M_\odot$. Wir werden trotzdem annehmen, daß das Gaselement die Massenzunahme des Protosterns nicht „spürt". Wenn wir einen Außenradius von 1000 AE wählen, beträgt die akkretierte Masse ca. sogar $20\,M_\odot$! Unser Modell ist für solche Abstände nicht anwendbar. Deshalb wählen einen Außenradius von 40 AE.

6.9.2 Anfangsbedingungen für die Chemie

Die Wahl dieses Außenradius ist mit einem weiteren Problem verbunden: Die theoretische Temperatur bei größeren Entfernungen kann zu klein und deshalb unrealistisch werden. Eine Berechnung der chemischen Zusammensetzung der Gasphase bei dieser Temperatur würde zu sinnlosen Ergebnissen führen. Die Temperatur in der Scheibe sinkt in den äußeren Bereichen nicht unter 15 ... 20 K, da von außen die Scheibe noch geringfügig durch Strahlung aus der umgebenden Molekülwolke und durch gestreute Strahlung des Sterns geheizt wird. Dies ist in (41) nicht berücksichtigt. Wir verwenden bei der Berechnung der Reaktionsraten die Temperatur T=max(T_c, 15 K), wobei T_c die Lösung von (126) ist.

Es wird in dieser Arbeit eine Akkretionsscheibe mit einem bestimmten Außenradius betrachtet (also 40 AE). An deren Außenrand wird die chemische Zusammensetzung als Anfangsbedingung vorgegeben: Es wird hier angenommen, daß die Gasphase nur aus H_2, He, H und N_2 besteht. Wir nehmen eine Häufigkeit des atomaren Wasserstoffes von 10^{-5} an (fast der ganze verfügbare Wasserstoff ist in H_2 gebunden). Wenn $N_H = 2n_{H_2} + n_H$ (Gesamtzahl der Wasserstoffkerne) ist, haben wir

$$n_H = 10^{-5} N_H \, . \tag{127}$$

Außerdem gilt

$$n_{N_2} = \frac{1}{2}\epsilon_N N_H \tag{128}$$

und

$$n_{He} = 0.1 N_H \, . \tag{129}$$

Mit (42) erhalten wir den Gesamtdruck P am Außenrand und wir können daraus n_{H_2} bestimmen:

$$\frac{P}{kT_c} = n_{H_2} + n_H + n_{N_2} + n_{He} \, . \tag{130}$$

Anschließend können n_H, n_{N_2} und n_{He} bestimmt werden. Die Zahl der im Eis gebundenen CO–Moleküle beträgt 30% des verfügbaren Kohlenstoffes, da 70% im Graphit gebunden ist (Kap. 4.4.1). Man hat

$$n_{CO} = 0.3\epsilon_C N_H \, . \tag{131}$$

Der nicht im CO und nicht im Silikatstaub gebundene Sauerstoff liegt als H_2O vor:

$$n_{H_2O} = (\epsilon_O - 0.3\epsilon_C - 4\epsilon_{Si}) N_H \, . \tag{132}$$

Diese Annahme, daß der ganze ungebundene Sauerstoff als Wassereis vorliegt, ist unsicher, da in Molekülwolken der Sauerstoff nie vollständig in H_2O gebunden ist. Dies ist aber kein Beweis dafür, daß dies in dichten Objekten nicht möglich ist. In diesem Zusammenhang könnte die *Akkretionsstoßfront* am Rand der Akkretionsscheibe eine wichtige Rolle spielen [Neufeld & Hollenbach 1994]. Die Materie aus der umgebenden Molekülwolke „fällt“ in die Scheibe mit Geschwindigkeiten der Größenordnung $10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ ($s \geq 10$ AE) bis $100\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ ($s \leq 1$ AE) hinein. Selbst für mäßige Einsturzgeschwindigkeiten ($v \leq 10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$) erreichen die Temperaturen einige 1000 K im Stoß. Unsere Rechnungen (Kap. 7) zeigen, daß die meisten chemischen Reaktionen ab 1000 K aktiv werden. Es ist dann zu erwarten, daß der Stoß die ursprüngliche chemische Zusammensetzung der Materie stark modifiziert, da die Aktivierungsenergieschwellen zahlreicher Reaktionen überwunden werden können.

Ein Großteil des atomaren Sauerstoffes könnte z.B. hinter dem Stoß mit H_2 reagieren und OH erzeugen:

$$\mathrm{O} + \mathrm{H_2} \longrightarrow \mathrm{OH} + \mathrm{H} \, .$$

OH reagiert dann mit H_2

$$\mathrm{OH} + \mathrm{H_2} \longrightarrow \mathrm{H_2O} + \mathrm{H}$$

oder in einer langsameren Reaktion mit sich selbst

$$\mathrm{OH} + \mathrm{OH} \longrightarrow \mathrm{H_2O} + \mathrm{O}$$

und erzeugt Wasser. OH kann mit den C^+–Ionen reagieren und CO erzeugen:

$$\mathrm{OH} + \mathrm{C^+} \longrightarrow \mathrm{CO} + \mathrm{H^+}$$

Da die Temperatur hinter der Stoßfront in den äußeren Teilen der Akkretionsscheibe wieder auf einige K sinkt, sollten die gebildeten CO– und Wassermoleküle sofort auf dem Staub ausfrieren.

Die ursprünglichen Eismäntel verdampfen beim Durchgang durch die Stoßfront und kondensieren später hinter dem Stoß ebenfalls wieder aus. Auf jeden Fall ist das Verhalten der Materie beim Durchgang durch eine Akkretionsstoßfront bisher nur unzureichend bekannt und wir können im Rahmen dieser Modellrechnung bzgl. der chemischen Zusammensetzung nur Vermutungen ausstellen. Die Ergebnisse von Neufeld & Hollenbach (1994) zeigen wesentlich höhere Häufigkeiten von CO und H_2O hinter dem Stoß als vor dem Stoß. Es ist deswegen durchaus möglich, daß praktisch der ganze Kohlenstoff als CO und der restliche Sauerstoff, soweit er nicht im CO und im Silikatstaub gebunden ist, als H_2O anwesend sind.

Wenn aber ein Teil des ungebundenen Sauerstoffes nach dem Stoß immer noch als freies Atom anwesend ist, könnte die ganze Chemie verändert werden. Z.B. würde die Graphitoxidation durch O früher als in unserer Modellrechnung einsetzen. Da, wie gesagt, die chemischen Prozesse im Stoß unbekannt sind, wollen wir die ursprüngliche chemische Zusammensetzung so festlegen, daß der ganze ungebundene Sauerstoff als Wassereis anwesend ist.

Die chemische Entwicklung wird in einem Gaselement verfolgt, welches sich mit der radialen Geschwindigkeit (44) in Richtung Zentrum bewegt und dabei unterschiedliche Temperaturen und Drucke annimmt, die zu einer Änderung seiner chemischen Zusammensetzung führen. Die Berechnung der Temperatur erfolgt in jedem Integrationsschritt in selbstkonsistenter Weise unter Berücksichtigung der Staubopazität und einer Näherung für die Gasopazität (siehe Kap. 5.1). Die Staubteilchen liefern bei der Verdampfung und Zersetzung CO, H_2O, C, S, Fe, Mg, SiO und O in die Gasphase (siehe Kap. 4), sobald die entsprechenden Verdampfungstemperaturen erst für die Eismäntel und später für die Kohlenstoff–, Troilit– und Silikatteilchen erreicht sind. Die Chemie in der Akkretionsscheibe kann dann in ihrem zeitlichen Verlauf verfolgt werden.

6.9.3 Das numerische Verfahren

Die Modellierung der chemischen Prozesse in der Akkretionsscheibe führt zu einem *System von gewöhnlichen Differentialgleichungen* (124), in unserem Fall mit der algebraischen Gleichung (126) gekoppelt. Wir haben erwähnt, daß die Temperatur in der Scheibe von einigen K am äußeren Rand bis über 5000 K in der Nähe des Protosterns variiert. Da die Ratenkoeffizienten *exponentiell* von der Temperatur abhängen, ist das System sehr steif, was bedeutet, daß einige Lösungskomponenten sehr stark, andere hingegen nur sehr langsam abklingen.

Zur Integration solcher steifen Systeme haben sich BDF–Verfahren (*Backward Differentiation Formulae*) wegen ihrer guten Stabilitätseigenschaften bewährt. Es handelt sich dabei um Mehrschrittverfahren, basierend auf Polynominterpolation der vergangenen, bereits berechneten Werte. Zuerst wurde die Routine DDRIV3 verwendet [Kahaner *et al.* 1989], aber sie hat sich für unser Problem als ungeeignet erwiesen. Wir haben dann ein neues BDF–Verfahren (DAESOL) verwendet, das trotz teilweise sehr langer Rechenzeit (besonders für $s \leq 1$ AE) sich als sehr effizient erwiesen hat.

Wir wollen kurz das Prinzip eines BDF–Verfahrens erläutern. Betrachten wir eine gewöhnliche Differentialgleichung gekoppelt mit einer algebraischen Gleichung:

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f(t, y, z) \\ 0 &= g(t, y, z) \,. \end{aligned} \tag{133}$$

y ist hier ein Vektor ($y \in I\!R^m$). In einem BDF–Verfahren wird die Lösung durch ein Polynom P_{n+1} der Ordnung k approximiert. Wenn $t_n, \ldots, t_{n+1-k}$ die k Werte der vergangenen Zeiten und $y_n, \ldots, y_{n+1-k}$ die bei diesen Zeitpunkten berechneten Lösungen sind, wird verlangt, daß das Polynom bei jedem Zeitpunkt die entsprechende Lösung interpoliert:

$$P_{n+1}(t_{n+1-i}) = y_{n+1-i} \qquad i = 1, \ldots, k \quad . \tag{134}$$

Die Ableitung von P_{n+1} im aktuellen Zeitpunkt t_{n+1} ist

$$\dot{P}_{n+1}(t_{n+1}, z_{n+1}) = f(t_{n+1}, P_{n+1}(t_{n+1}, z_{n+1}), z_{n+1}) \,. \tag{135}$$

Wir haben somit $k+1$ Bedingungen, die das Polynom P_{n+1} festlegen. Die Ableitung von P_{n+1} ist gegeben durch:

$$\dot{P}_{n+1} =: -\frac{1}{h}(\alpha y_{n+1} + C) \tag{136}$$

h ist die aktuelle Schrittweite. Wir müssen dann bei jedem Zeitsschritt das folgende System lösen:

$$\begin{aligned} \alpha y_{n+1} + C &= -hf(t_{n+1}, P_{n+1}(t_{n+1}, z_{n+1}), z_{n+1}) \\ 0 &= g(t_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1}) \,. \end{aligned} \tag{137}$$

C steht für alle Terme des Polynoms, die y_{n+1} nicht enthalten und α ist ein numerischer Faktor. Das implizite nichtlineare System (137) wird mit einem Newton–Verfahren gelöst.

Für die konkrete Rechnung wurde eine Implementation des Verfahrens verwendet, die im Teilprojekt A4 (Arbeitsgebiet 1) des Sonderforschungsbereiches 359 „Reaktive Strömungen“ von H.G. Bock, J.P. Schlöder und I. Bauer entwickelt und freundlicherweise für diese Arbeit zur Verfügung gestellt wurde.

Für eine genauere Beschreibung und einen Vergleich der Effizienz von DAESOL und DDRIV3 verweisen wir auf Bauer *et al.* (1996).

7 Ergebnisse und ihre Bedeutung

7.1 Generelle Bemerkungen über die Chemie

In diesem Kapitel stellen wir die Ergebnisse der Modellrechnung vor. Wir berücksichtigen die komplette Chemie der Elemente H, C, N, O, Si und S. Die Ergebnisse der Modellrechnung sind in den Abb. 9 bis 24 dargestellt. Abb. 9, 10 und 11 zeigen die Teilchendichten der verschiedenen neutralen Spezies als Funktion der radialen Entfernung vom Protostern. Abb. 12, 13 und 14 zeigen den Verlauf der verschiedenen Ionen und des Heliums. Aus Gründen der Übersichtlichkeit haben wir zwischen 3.1 und 0.31 AE und zwischen 0.13 und 0.02 AE die Spezies nach den verschiedenen chemischen Untersystemen getrennt dargestellt (diese sind im Kap. 7.4 definiert). Abb. 15 zeigt die Spezies des sog. C–Systems, Abb. 16 die Spezies des OH–Systems, Abb. 17 die Spezies des N–Systems, Abb. 18 die Spezies des S–Systems und Abb. 19 die Spezies des Si–Systems. Das gleiche gilt für die Abb. 20 bis 24 zwischen 0.13 und 0.02 AE. Deshalb haben wir in Abb. 10 und 11 in diesen Bereichen nicht alle Spezies gekennzeichnet. Wir wollen zuerst generelle Feststellungen über den Verlauf der Chemie in der Zentralebene treffen, bevor wir in den nächsten Abschnitten die verschiedenen chemischen Systeme genauer analysieren.

Obwohl unsere protoplanetare Scheibe einen Radius von ≈ 40 AE hat, wurde die Rechnung bei 1000 AE begonnen. Der Grund ist, daß der genaue Anfangswert des H/H_2–Verhältnisses nicht bekannt ist. Der äußere Radius wurde deswegen zu groß gewählt, damit sich das H/H_2–Verhältnis auf einen quasistationären Gleichgewichtszustand einstellen kann, ehe das Gas in den interessierenden Bereich $s \approx 40$ AE eintritt. Die angenommene Teilchendichte für H ($n_{\mathrm{H}} = 10^{-5}\, N_{\mathrm{H}}$) ist eigentlich zu hoch. Aufgrund der Dreiteilchenreaktion

$$\mathrm{H_2 + H + H \longrightarrow H_2 + H_2} \tag{I}$$

werden am Außenrand der Scheibe H_2–Moleküle gebildet. Die charakteristische Zeitskala für diese Reaktion beträgt $10^{13} - 10^{15}$ s bei Temperaturen von einigen K, d.h. ungefähr gleich der Akkretionszeitskala. Diese Reaktion ist also extrem langsam aber trotzdem sehr wichtig, da sie in einem Bereich stattfindet, in dem die anderen Reaktionen inaktiv sind. Bei etwa 40 AE erreicht n_{H} ein Minimum und das H/H_2–Verhältnis hat sich auf einen quasistationären Zustand eingestellt. Wir nehmen diese Konzentration als Anfangskonzentration für unsere Modellrechnung.

In dem Bereich zwischen 40 und ≈ 7.3 AE (Abb. 9) verdampfen die beiden in der Modellrechnung berücksichtigten Eissorten. Als erstes verdampft das CO–Eis bei einem Abstand von etwa 25 AE (die Temperatur beträgt bei diesem Abstand etwa 25 K). Bei 8 AE ($T_c \approx 150$ K) ist das H_2O–Eis verdampft. In Abb. 9 macht sich dies durch den raschen Anstieg der Teilchendichten von CO und H_2O bemerkbar.

Sonstige chemische Reaktionen zwischen neutralen Spezies (abgesehen von der oben erwähnten Dreiteilchenreaktion) sind in diesem ganzen Bereich wegen der geringen Temperatur kinetisch verboten.

Abb. 10 zeigt die Teilchendichten zwischen 7.3 AE und ca. 0.13 AE. In diesem Bereich steigt die Temperatur von 200 auf fast 2000 K an. Wie man sieht, wird die Chemie ab ca. 2.5 AE aktiv, weil für zahlreiche Reaktionen die Aktivierungsenergieschwellen durch die hohe Temperatur überwunden werden können.

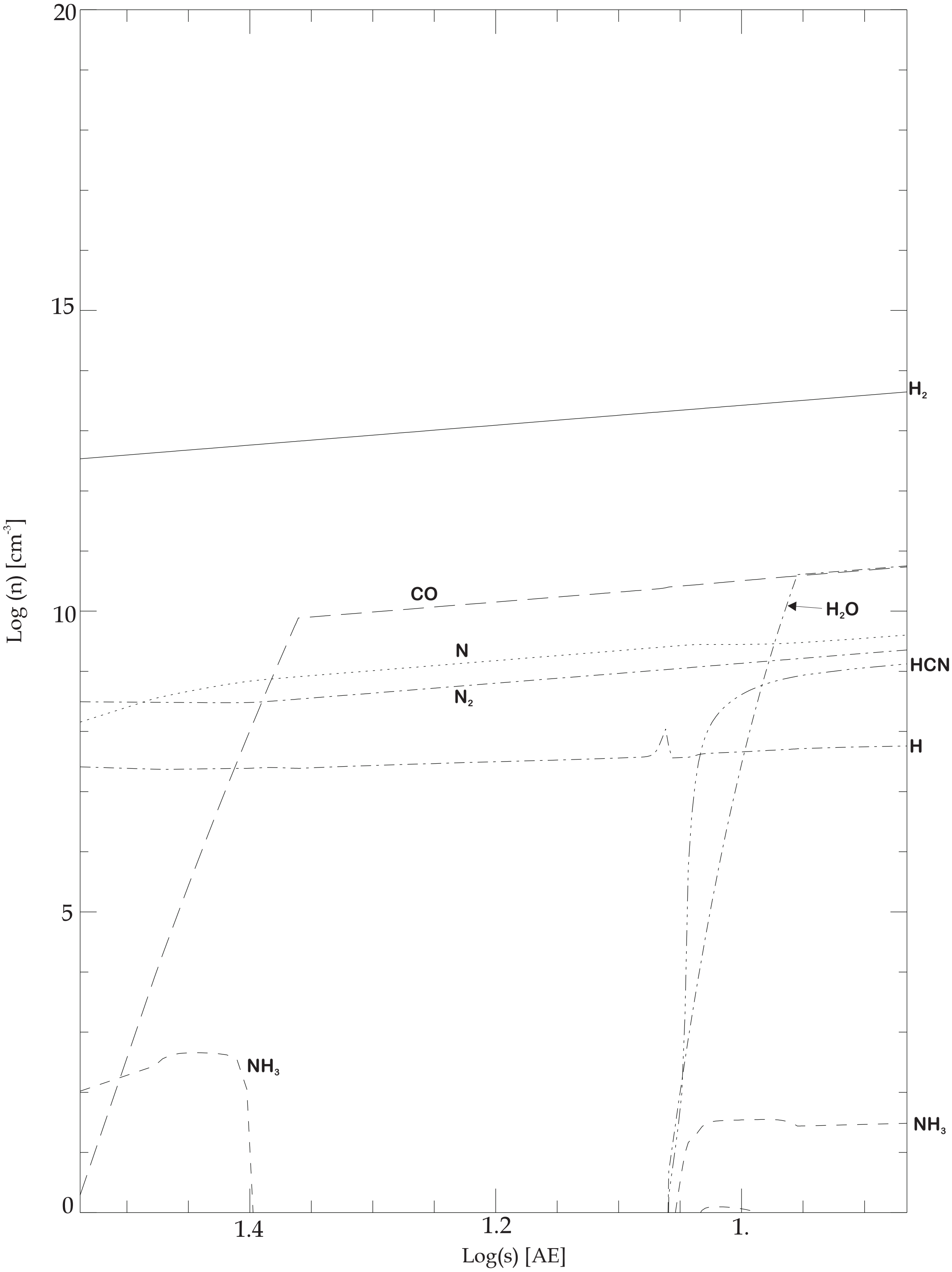

Abbildung 9: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 40 AE und ca. 7.3 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

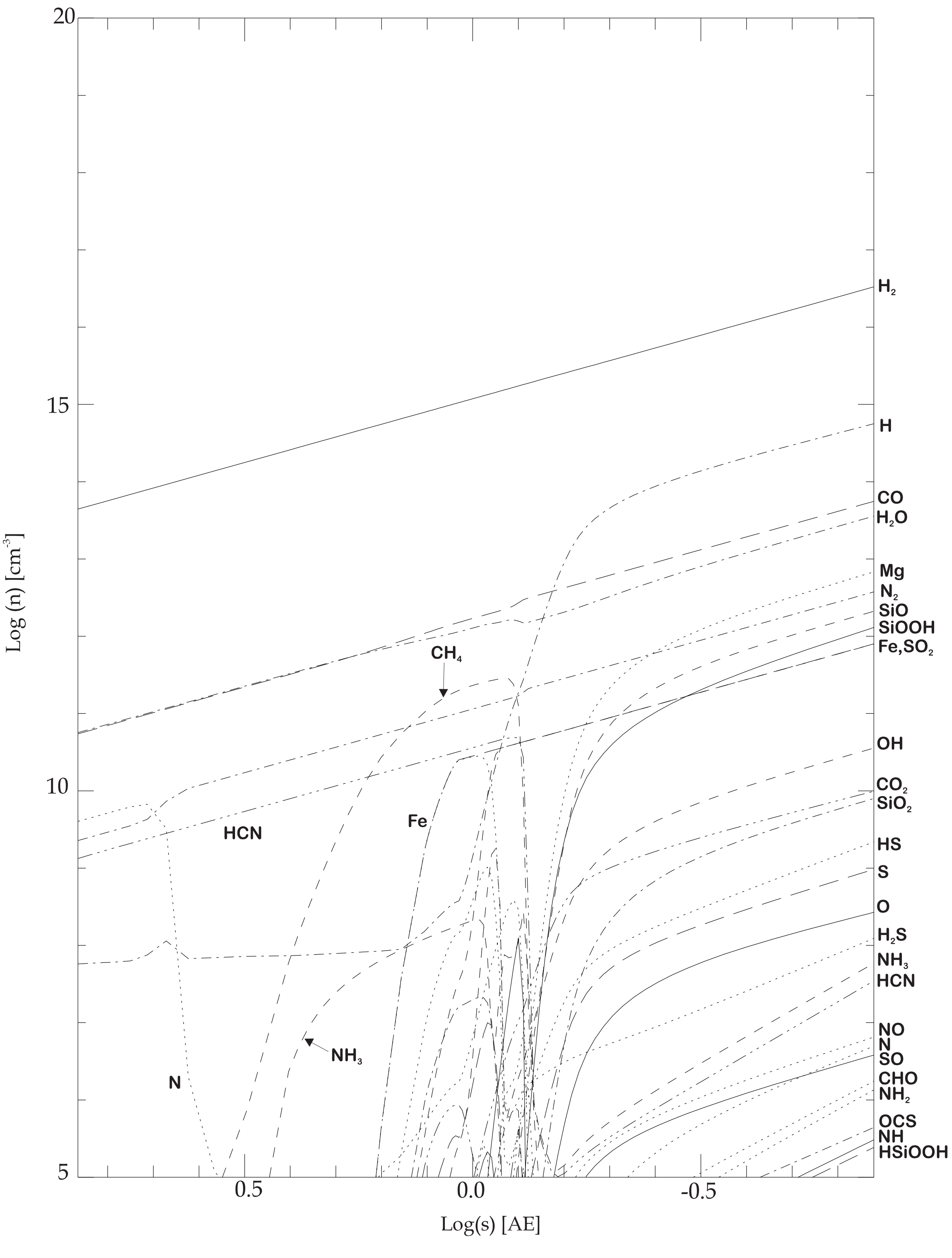

Abbildung 10: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 7.3 AE und ca. 0.13 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

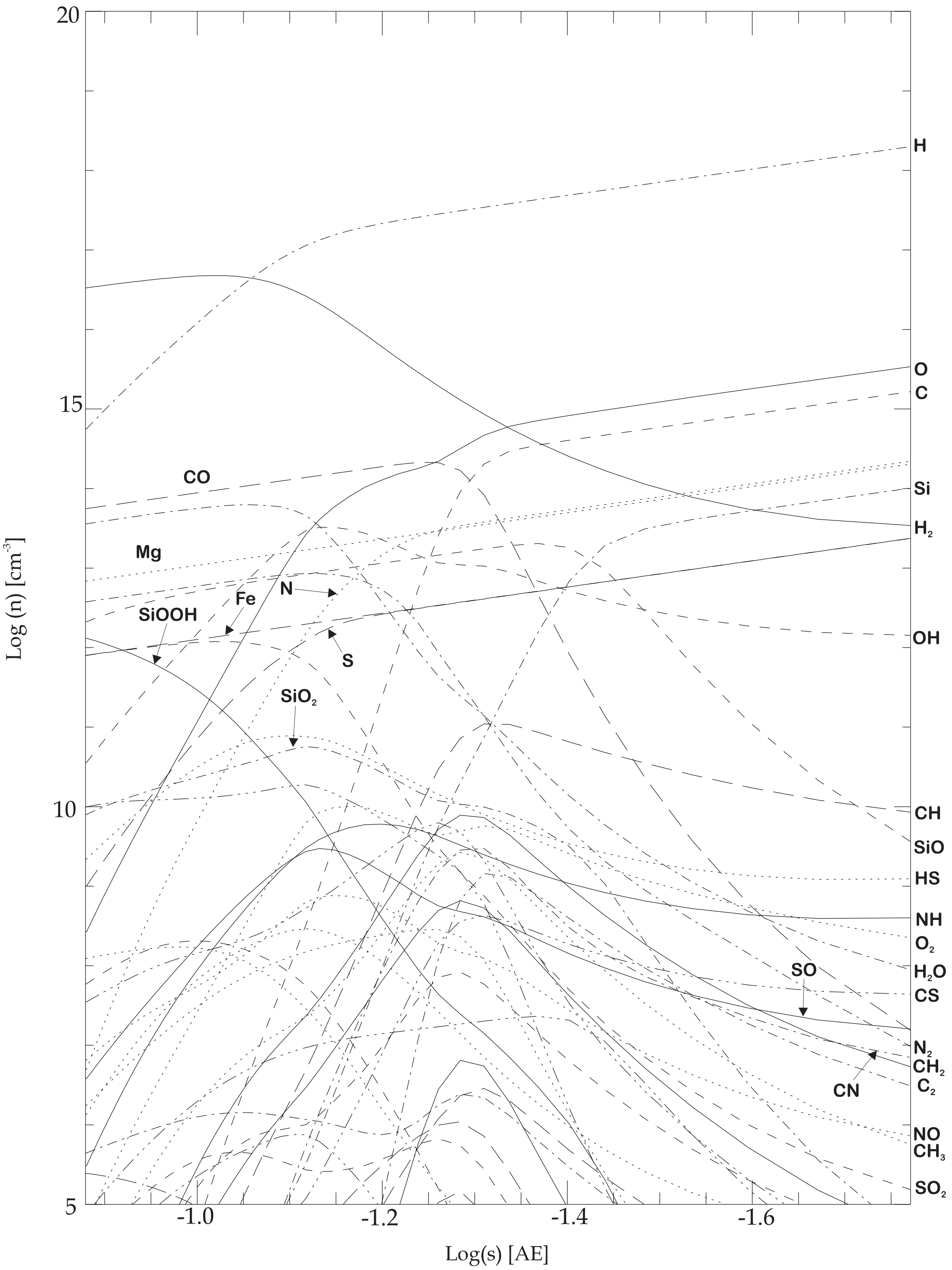

Abbildung 11: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 0.13 AE und ca. 0.02 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

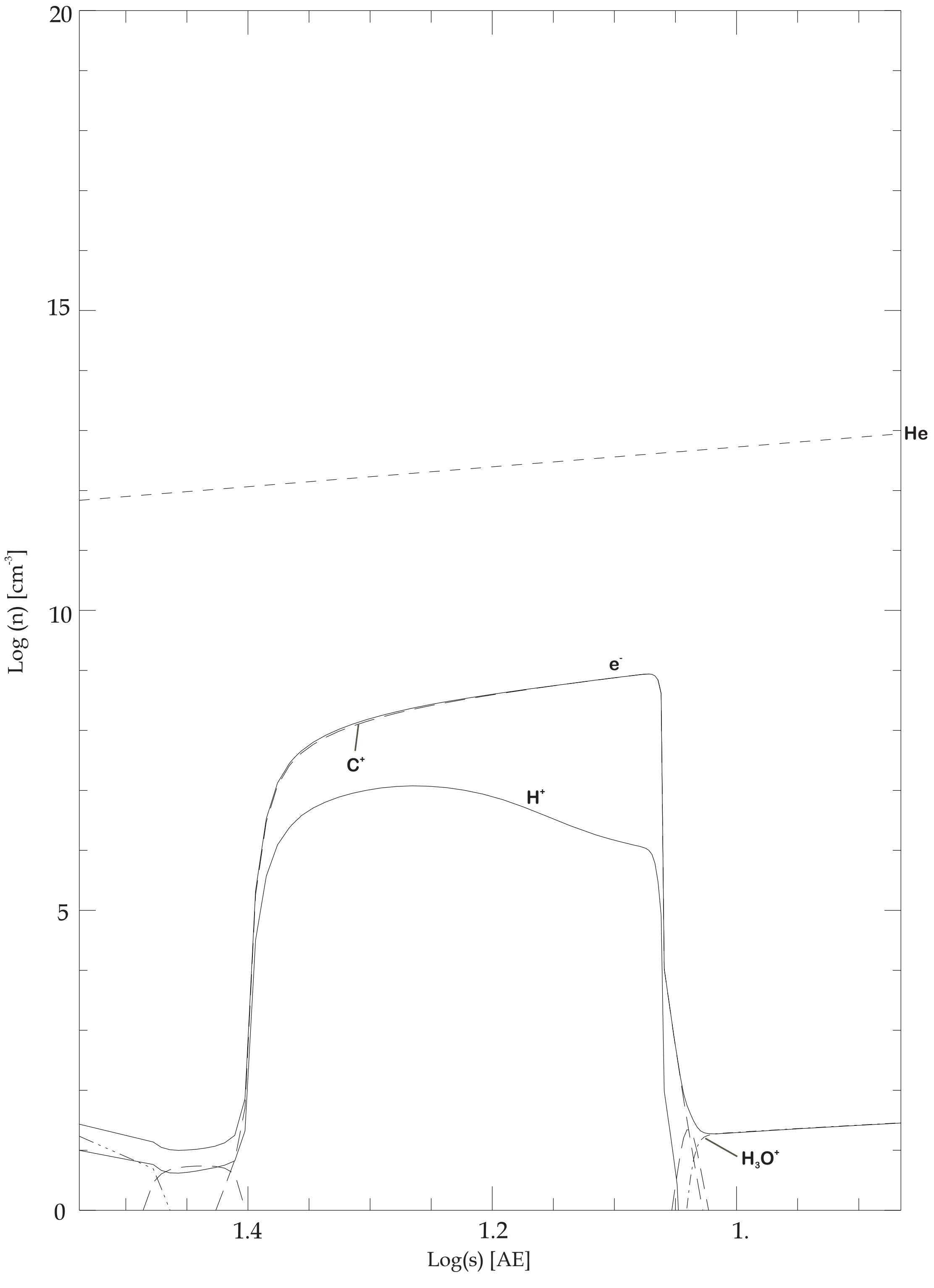

Abbildung 12: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 40 AE und ca. 7.3 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

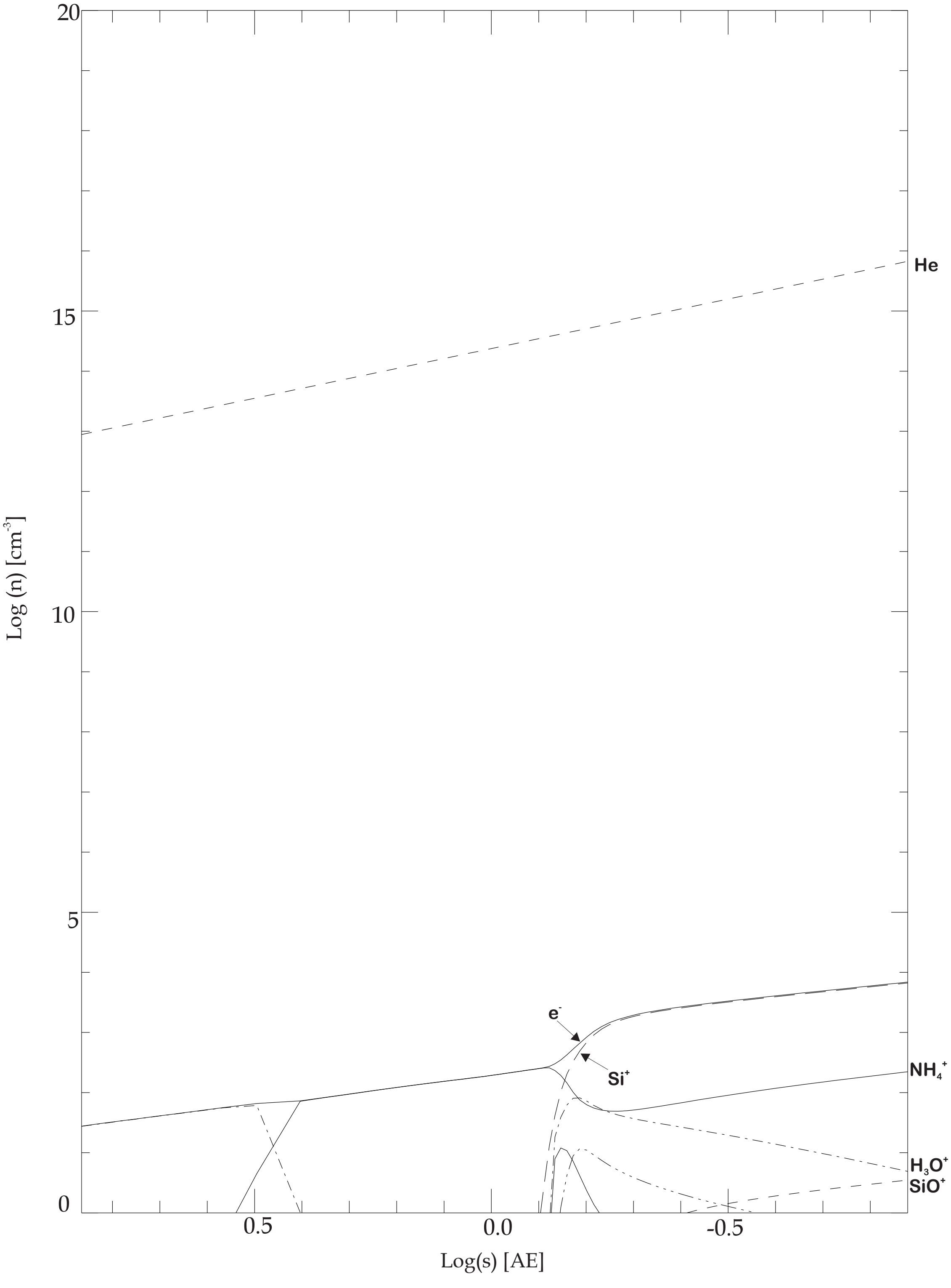

Abbildung 13: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 7.3 AE und ca. 0.13 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

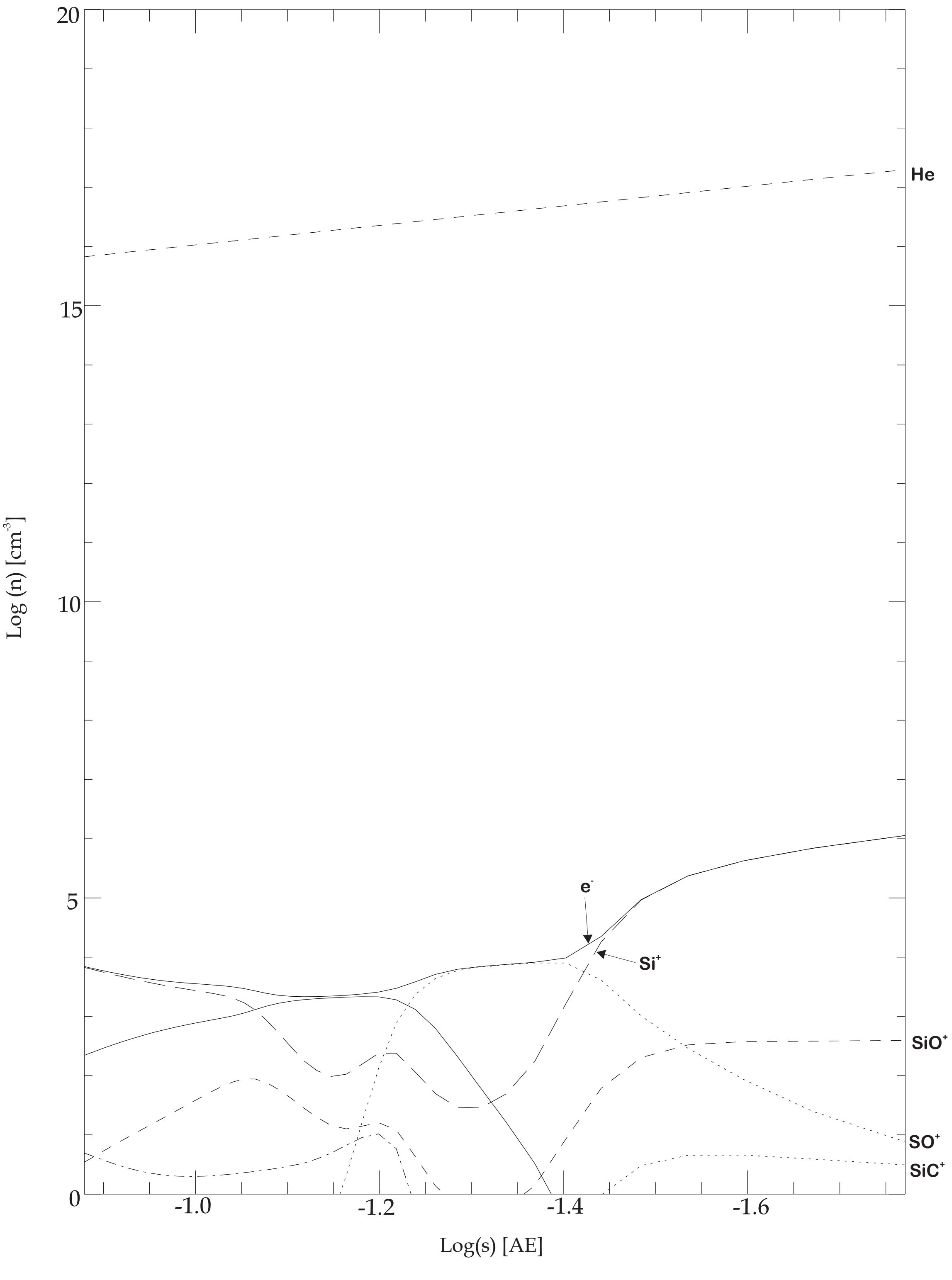

Abbildung 14: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe zwischen 0.13 AE und ca. 0.02 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

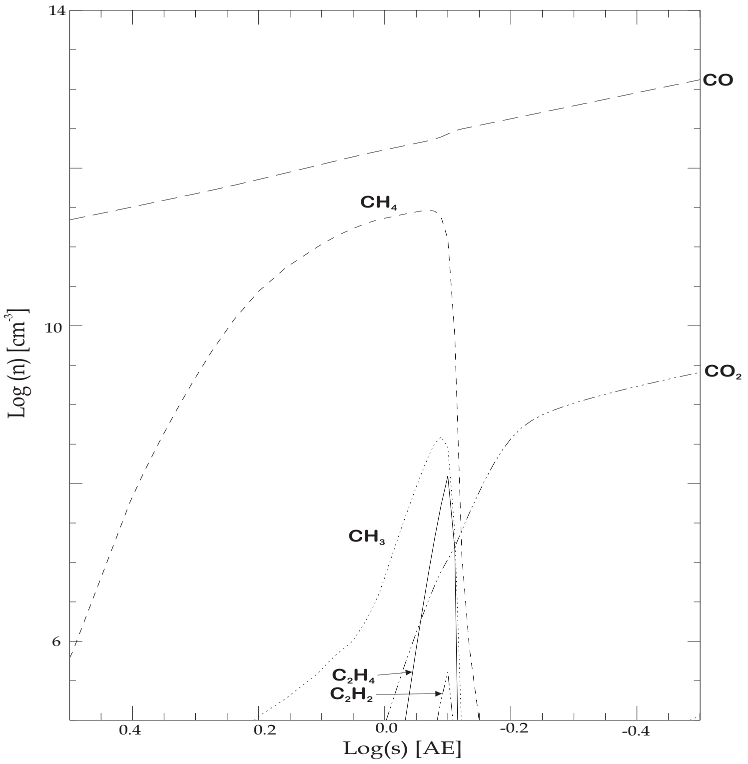

Abbildung 15: *Neutrale Spezies des* C*–Systems zwischen 3.1 AE und 0.31 AE.*

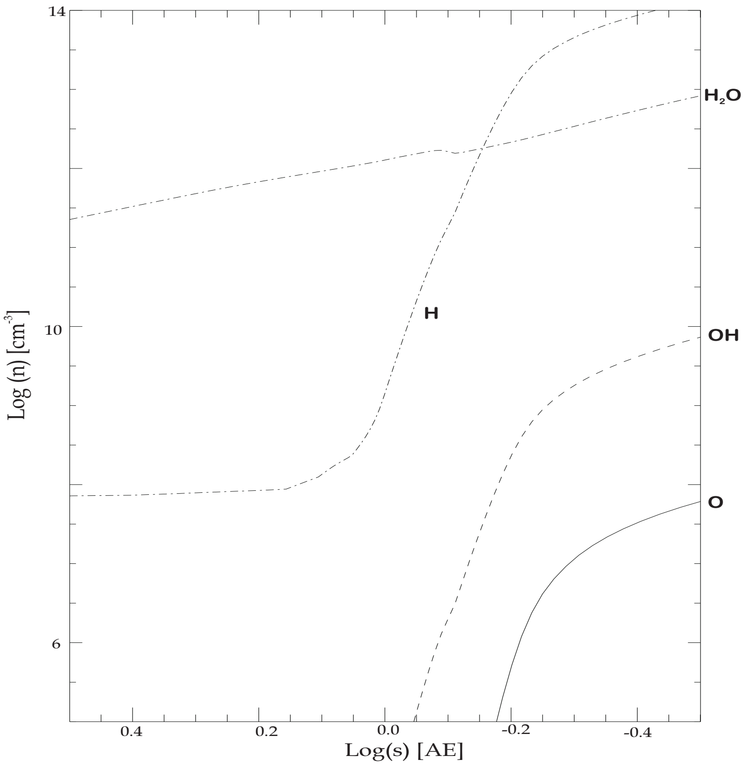

Abbildung 16: *Neutrale Spezies des* OH*–Systems zwischen 3.1 AE und 0.31 AE.*

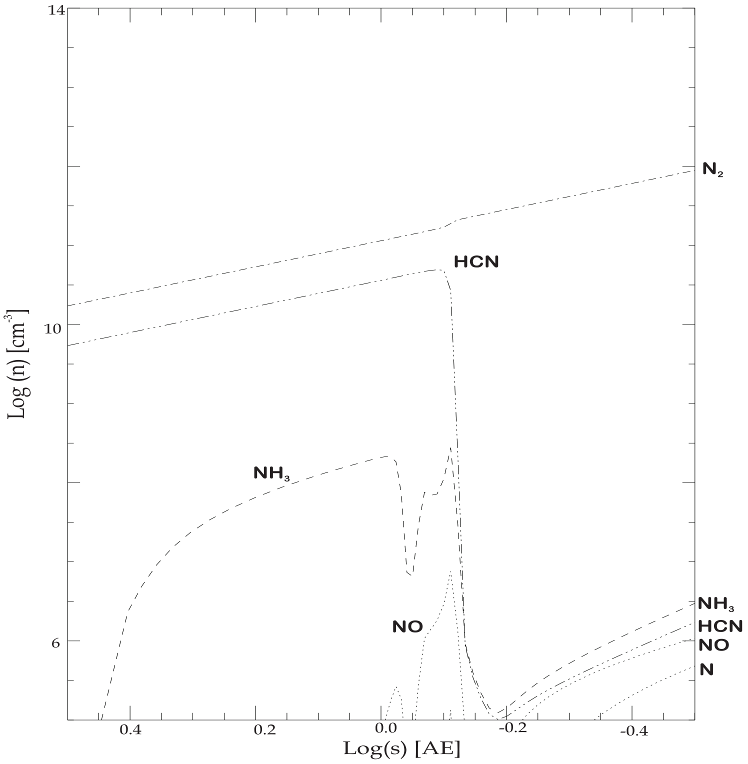

Abbildung 17: *Neutrale Spezies des* N*–Systems zwischen 3.1 AE und 0.31 AE.*

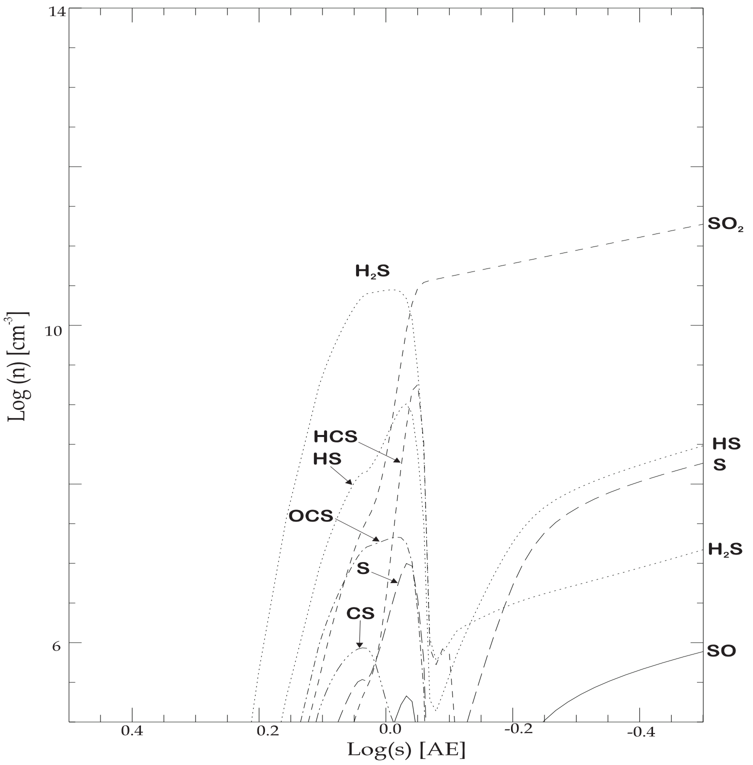

Abbildung 18: *Neutrale Spezies des* S*–Systems zwischen 3.1 AE und 0.31 AE.*

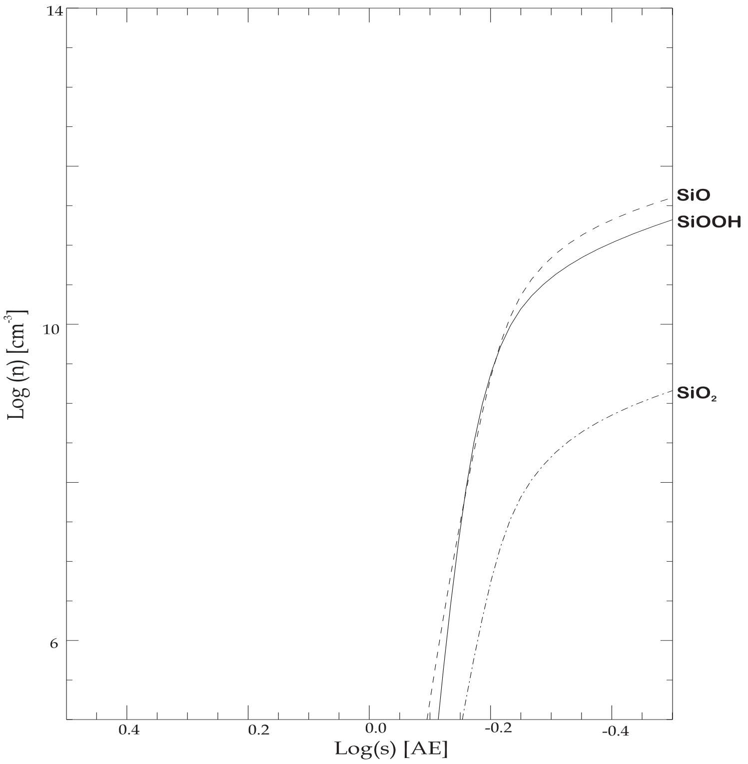

Abbildung 19: *Neutrale Spezies des* Si*–Systems zwischen 3.1 AE und 0.31 AE.*

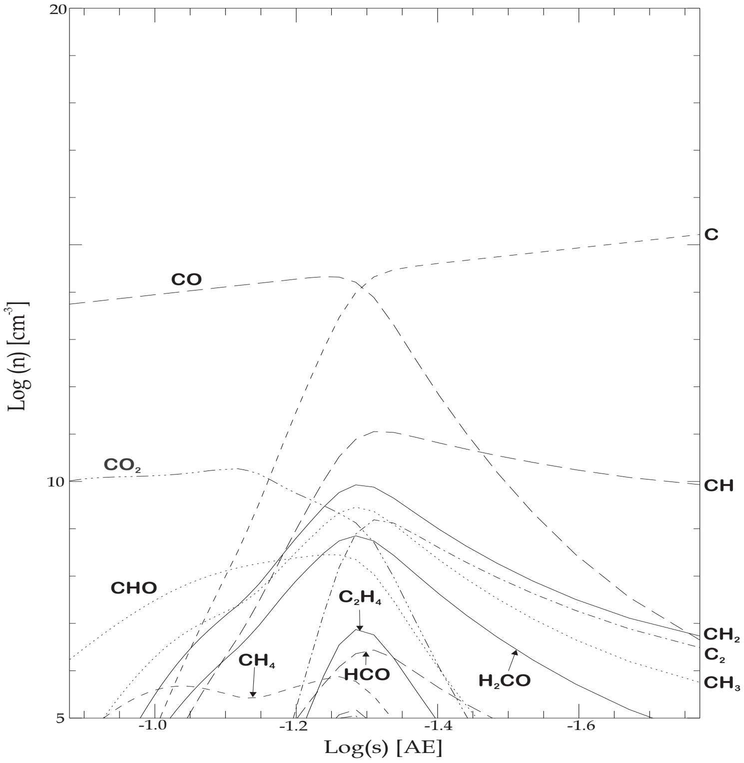

Abbildung 20: *Neutrale Spezies des* C*–Systems zwischen 0.13 AE und 0.02 AE.*

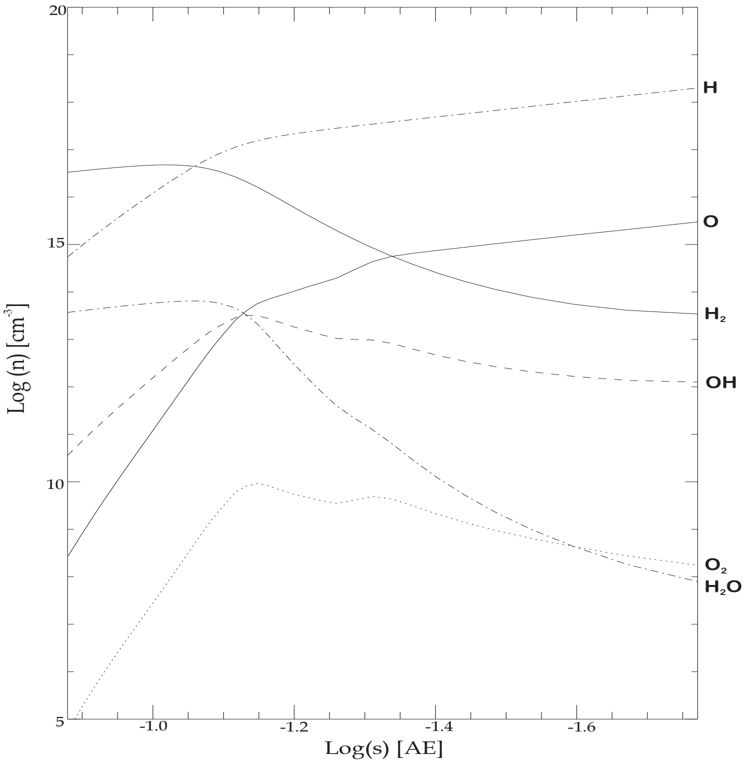

Abbildung 21: *Neutrale Spezies des* OH*–Systems zwischen 0.13 AE und 0.02 AE.*

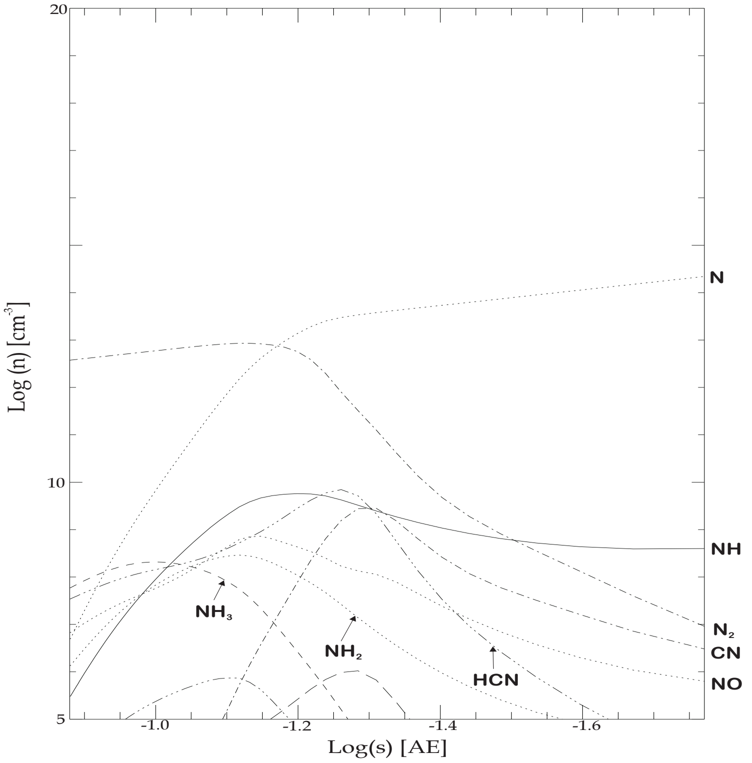

Abbildung 22: *Neutrale Spezies des* N*–Systems zwischen 0.13 AE und 0.02 AE.*

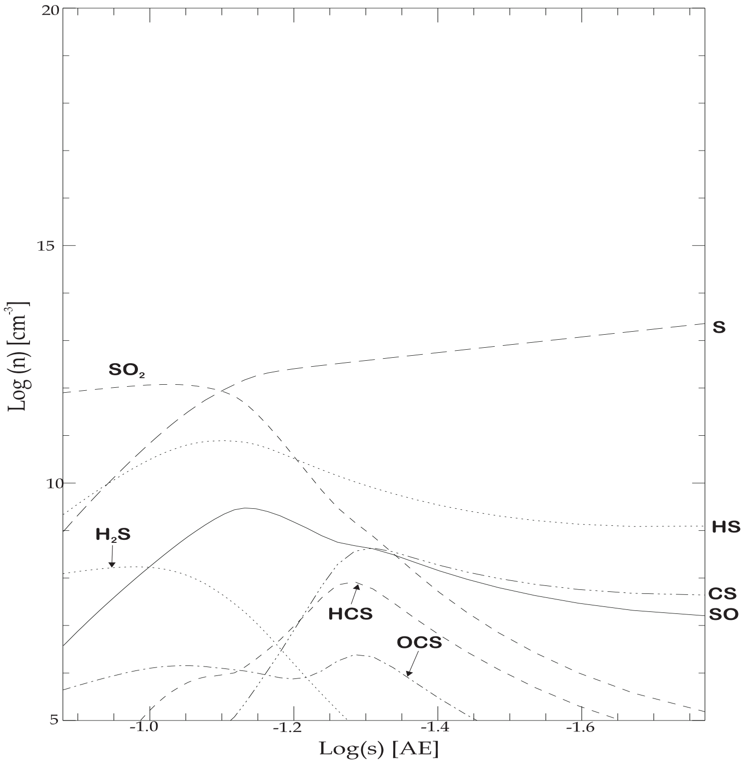

Abbildung 23: *Neutrale Spezies des* S*–Systems zwischen 0.13 AE und 0.02 AE.*

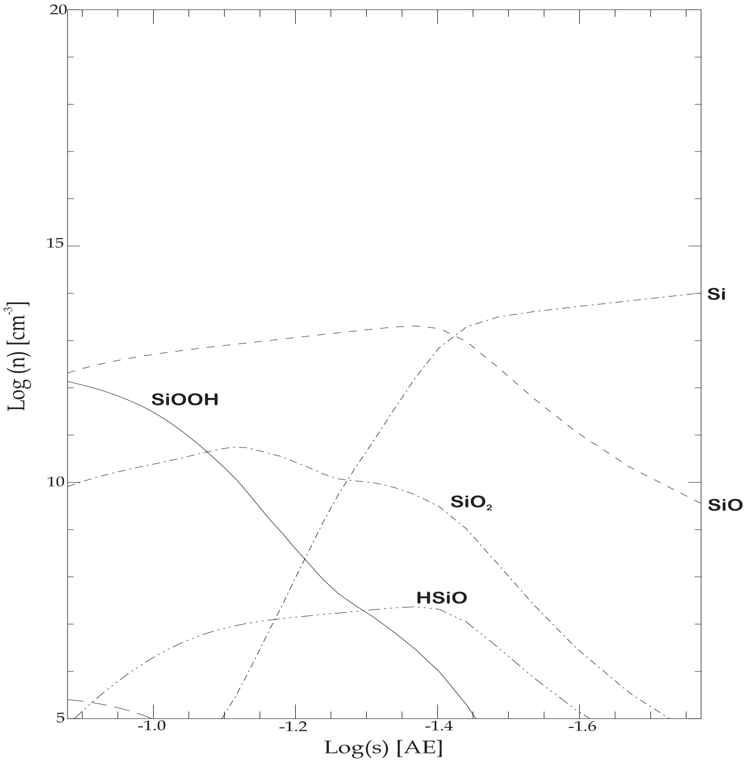

Abbildung 24: *Neutrale Spezies des* Si*–Systems zwischen 0.13 AE und 0.02 AE.*

Zwischen 2 AE ($T_c \approx 650\,$K) und 1 AE ($T_c \approx 1000\,$K) werden die Kohlenstoffteilchen durch Oxidation zerstört (die reine Kohlenstoffverdampfung würde erst ab ca. 1500 K stattfinden – siehe Bauer *et al.* (1996)). Dies macht sich in Abb. 10 und 15 durch den raschen Anstieg der Teilchendichte von Methan (CH_4) bemerkbar, das ein Folgeprodukt des chemischen Sputterings des Kohlenstoffs ist. Die Oxidation durch OH ist somit ein Prozeß von grundlegender Bedeutung. Bei der Verdampfung werden C_i–Moleküle in die Gasphase abgegeben, die mit dem reichlich vorhandenen H reagieren und zunächst Moleküle der Form CH_i (i=1,...,4) bilden. Die Moleküle CH_i reagieren dann entweder mit O oder OH zu HCO oder H_2CO und dies rasch weiter zum CO, oder sie bilden in Kondensationsreaktionen C_2H_4 (Ethylen), das dann weiter zum u.a. C_2H_3 (Vinyl) und schließlich zum CO reagiert. Die Verdampfung spielt aber neben der Oxidation keine große Rolle.

Anschließend verdampfen zwischen 0.6 AE ($T_c \approx 1600\,$K) und 0.13 AE ($T_c \approx 2000\,$K) die Olivinteilchen unter Zersetzung und injizieren Mg, SiO und O in die Gasphase. Bei hohen Temperaturen wird SiO durch Stoßdissoziation mit H und H_2 dissoziiert:

$$\begin{array}{ccccccccc} \mathrm{SiO} & + & \mathrm{H} & \longrightarrow & \mathrm{Si} & + & \mathrm{O} & + & \mathrm{H} \\ \mathrm{SiO} & + & \mathrm{H_2} & \longrightarrow & \mathrm{Si} & + & \mathrm{O} & + & \mathrm{H_2}\,. \end{array} \tag{II}$$

Die Ratenkoeffizienten dieser Reaktionen werden entsprechend denen der ähnlichen Stoßdissoziation für CO berechnet. Wir nehmen an, daß der Frequenzfaktor k_0 der gleiche ist: $k_0 = 6 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3\,s^{-1}}$. Die Aktivierungsenergie E_a wird gleich der Bindungsenergie von SiO (E_a=8.28 eV) gesetzt. Diese Energie entspricht einer Temperatur von 96 000 K. Der Ratenkoeffizient dieser beiden Reaktionen ist dann

$$k = 6 \cdot 10^{-9} \exp\left(-\frac{96\,000}{T}\right) \quad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{s}}\right].$$

Der freigesetzte Sauerstoff reagiert, wie zu erwarten, zu H_2O. Eine deutliche Zunahme der Teilchendichte von H_2O ist in Abb. 10 und 16 zwischen 0.8 und 0.12 AE zu beobachten.

Abb. 11 zeigt in vergrößertem Maßstab den inneren Teil der protoplanetaren Scheibe, in dem eine große Zahl verschiedener Molekülsorten auftritt, weil bei Temperaturen oberhalb 1000 K eine Vielzahl von Reaktionen einsetzt, die bei niedrigen Temperaturen durch Aktivierungsenergieschwellen kinetisch verboten sind. Unterhalb 0.05 AE verschwinden die meisten Moleküle durch Abbaureaktionen und durch thermische Dissoziation. Die Dissoziation des molekularen Wasserstoffes findet bei etwa 0.09 AE statt. In der Nähe des Scheibenzentrums bleiben nur C, H, O, N, S, Si, Fe und Mg übrig.

Die Ionisation durch kosmische Strahlung (c.r.) und radioaktive Kerne bilden den Einstieg in die Ionenchemie. Die Reaktionen, die die allerersten Ionen erzeugen, sind:

$$\mathrm{H_2} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{H_2}^+ + \mathrm{e}^- \tag{III}$$

$$\mathrm{H_2} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{H}^+ + \mathrm{H} + \mathrm{e}^- \tag{IV}$$

$$\mathrm{H} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{H}^+ + \mathrm{e}^- \tag{V}$$

$$\mathrm{He} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{He}^+ + \mathrm{e}^- \tag{VI}$$

$$\mathrm{CO} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{CO}^+ + \mathrm{e}^-\,. \tag{VII}$$

H_2^+ und He^+ werden zusätzlich auch durch die Al^{26}–Zerfälle erzeugt. Die Folgereaktionen werden in Kap. 7.4 beschrieben.

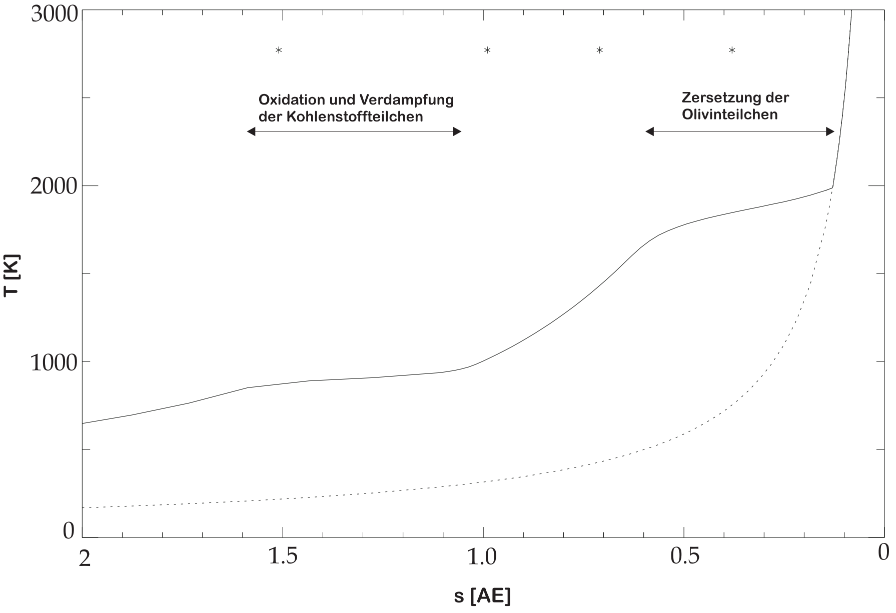

Abbildung 25: *Temperaturverlauf in der mittleren Ebene der Scheibe (durchgezogene Kurve). Die gestrichelte Kurve zeigt zum Vergleich die Temperatur in einem Modell ohne Staubteilchen. Die Sternchen zeigen die Position der Planeten von Mars bis Merkur.*

Man sieht (Abb. 12), daß die Ionenchemie nur in den äußeren Regionen der Scheibe (zwischen 40 AE und 7 AE) wirklich aktiv ist. Allerdings sind nur die Ionen C^+ und H^+ in merklichen Mengen anwesend. Die Teilchendichte dieser Ionen (und auch der Elektronen) erreicht ein Maximum zwischen ca. 22 AE ($T_c \approx 27$ K) und 11 AE ($T_c \approx 103$ K). Sie verschwinden plötzlich aufgrund des Anstiegs der Reaktionsprozesse der Ionen mit H_2O mit steigender Temperatur, wenn das Wassereis verdampft, und es sind, wie Abb. 13 und 14 zeigen, in den restlichen Teilen der Scheibe keine großen Mengen an Ionen vorhanden. Nur in der Nähe des Scheibenzentrums ($s \approx 0.025$ AE) bildet sich Si^+. Auf jeden Fall werden die in der Rechnung berücksichtigten anderen Ionen nirgends in erheblichen Mengen gebildet.

7.2 Temperaturverlauf

Abb. 25 zeigt die Temperatur in der mittleren Ebene der Scheibe. Diese kann mit der Temperatur, wie sie sich ohne Staubteilchen einstellen würde (d.h. in unserem Fall bei einer geschätzten Rosseland–Opazität von $0.01\,\mathrm{cm^2\,g^{-1}}$ für das Gas – gestrichelte Kurve), als Funktion des radialen Abstands verglichen werden. Die Temperaturkurve in Abb. 25 zeigt zwei Plateaus, die der Oxidation der Kohlenstoffteilchen (zwischen 1.6 AE und 1 AE) und der Verdampfung der Olivinteilchen (zwischen 0.6 AE und 0.15 AE) entsprechen. Diese Plateaus werden durch die Opazitätsabnahme bei der Staubverdampfung verursacht, die der Temperaturzunahme entgegenwirkt. Wenn alle Staubteilchen verschwunden sind, d.h. wenn die Opazität nur noch durch die Gasopazität bestimmt wird, treffen sich die beiden Kurven. Das erste Plateau, das der Oxidation der Kohlenstoffteilchen entspricht, ist nicht so deutlich ausgeprägt wie das zweite. Aufgrund der Oxidation durch O–Atome verschwinden die Kohlenstoffteilchen schon ab ca. 2 AE. Wie wir im Kap. 4.2.3 gesehen haben, ist die Bildung von relativ großen Mengen freier O–Atome zwischen 10 und 1 AE im Rahmen unseres Modells nur durch die Existenz von Ionisationsprozessen möglich.

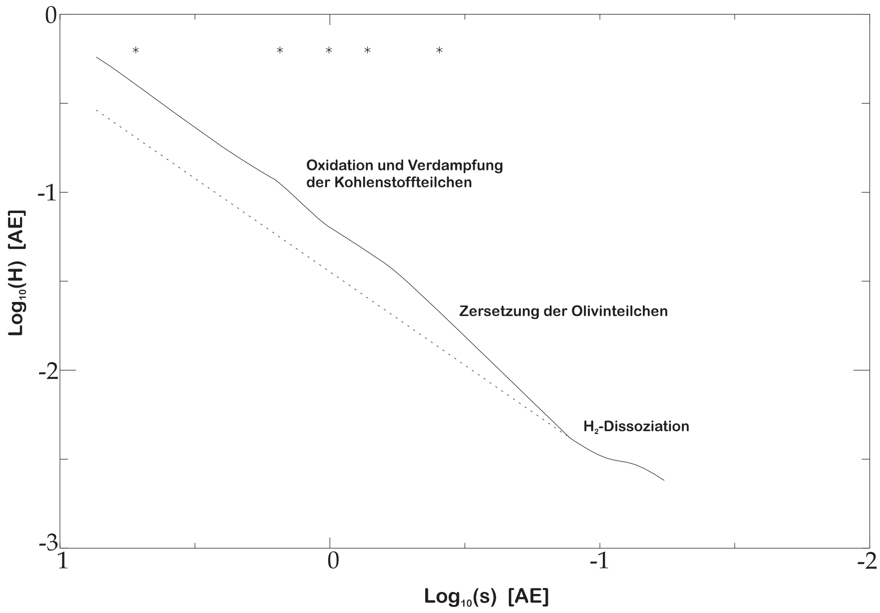

Abbildung 26: *Dicke der Akkretionsscheibe (durchgezogene Linie). Die gestrichelte Linie zeigt die Höhe der Scheibe ohne Staubteilchen. Die Sternchen zeigen die Position der Planeten von Jupiter bis Merkur.*

7.3 Dicke der Scheibe

Abb. 26 zeigt die Dicke der Akkretionsscheibe als Funktion des radialen Abstandes. Die Höhenabnahme aufgrund der abnehmenden Absorption ist deutlich zu erkennen. Die Kurve zeigt zusätzlich ein kleines Plateau bei etwa 0.06 AE, wenn H_2 dissoziiert wird. Die zunehmende Teilchendichte in diesem Gebiet verhindert zeitweilig eine weitere Abnahme der Dicke.

7.4 Analyse der chemischen Wege

Das Ziel dieser Arbeit ist eine detaillierte Analyse der verschiedenen Bildungs– und Abbauprozesse der chemischen Spezies. Üblicherweise teilt man ein ganzes chemisches System in Untersysteme ein, die bestimmte Arten von Atomen, Molekülen und Ionen sowie die chemischen Reaktionen, die diese Spezies koppeln, enthalten. In unserem Fall ist es günstig fünf Untersysteme zu betrachten:

- kohlenstoffhaltige Spezies (C–System),
- sauerstoff– und wasserstoffhaltige Spezies (OH–System),
- stickstoffhaltige Spezies (N–System),
- siliziumhaltige Spezies (Si–System),
- schwefelhaltige Spezies (S–System).

7.4.1 Das C–System

neutrale Chemie:
Das wichtigste Molekül in diesem System ist CO (Kohlenmonoxid). Wir haben schon

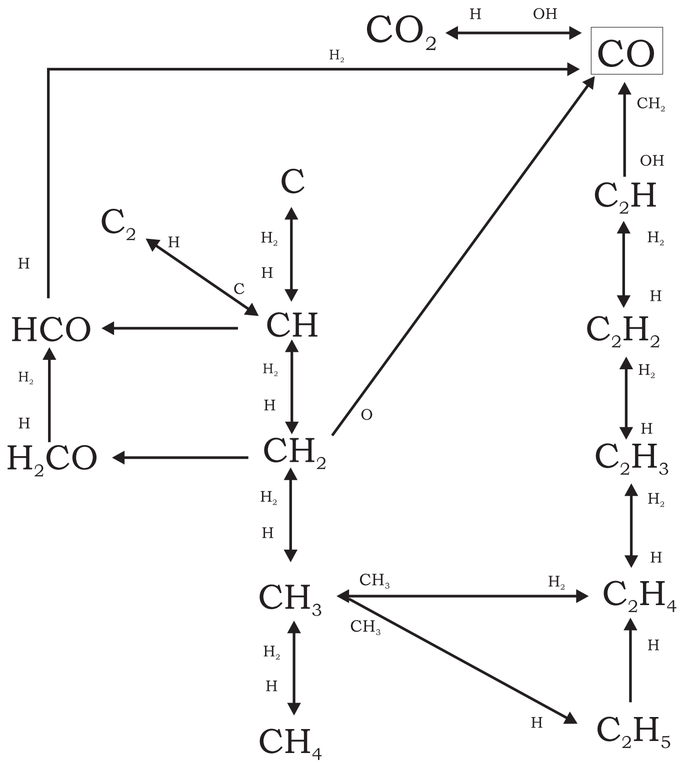

Abbildung 27: *Hauptreaktionen des* C*–Systems bei ca. 1 AE.*

erwähnt, daß CO unter allen zweiatomigen Molekülen das stabilste Molekül überhaupt ist. In unserem Modell kann CO nur durch Stoßdissoziation mit H und H_2 abgebaut werden. CO ist, wie oft in der Astrochemie, das Schlüsselmolekül, das den Anteil von C oder O in einem chemischen System bestimmt, der an der Gasphasenchemie teilnehmen kann. CO wird durch Eisverdampfung bei etwa 30 K in die Gasphase injiziert.

Der Kohlenstoff, der nicht in CO gebunden ist, spielt eine grundlegende Rolle in der ganzen Chemie aufgrund seiner Fähigkeit, komplizierte Verbindungen zu bilden. Kohlenstoff wird bei der Oxidation der Graphitteilchen in die Gasphase abgegeben (Abb. 10). Den hier verwendeten Oxidationsmechanismus durch OH haben wir schon in Kap. 4.2.3 beschrieben. Die Oxidation liefert zunächst HCCO in die Gasphase, das sofort mit H reagiert:

$$\mathrm{HCCO} + \mathrm{H} \longrightarrow \mathrm{CH_2} + \mathrm{CO}\,. \qquad \text{(VIII)}$$

Dies führt zur prompten Umwandlung eines der beiden freigesetzten C–Atome in ein CO–Molekül: zwischen 1.6 AE ($T_c \approx 750$ K) und 0.8 AE ($T_c \approx 1300$ K) ist eine deutliche Zunahme der CO–Dichte festzustellen. Die freigesetzten CH_2–Moleküle reagieren mit H_2 und bilden CH_3 und sehr viel Methan (IX) als Zwischenprodukte. Diese Zwischenprodukte sind in Abb. 10 und besonders in Abb. 15 deutlich zu sehen. Ein fundamentaler Punkt ist, daß diese organischen Moleküle das Maximum ihrer Häufigkeit zwischen 1.4 und 0.8 AE erreichen, d.h. *dort, wo sich heutzutage die terrestrischen Planeten befinden.* Die Erde befindet sich genau in der Mitte dieses Gebietes. Daraus folgt, daß die Erde in einer Umgebung entstanden ist, in dem riesige Mengen organischer Moleküle anwesend waren. Wir erwarten die Bildung auch weitaus komplexerer CH-Verbindungen, aber wir haben zur Zeit noch nicht genügend Reaktionen in unserem chemischen Netzwerk integriert, um deren Synthese modellieren zu können.

Das Auftreten einer solch hohen Methankonzentration wäre ohne die Oxidation nicht möglich. Die ersten Rechnungen *ohne* Berücksichtigung des Oxidationsprozesses durch OH haben ebenfalls diese Zwischenprodukte ergeben, die entsprechenden Konzentrationen waren allerdings um einen Faktor 10^4 kleiner [Bauer *et al.* 1996].

Die reine Kohlenstoffverdampfung findet ebenfalls statt, auch wenn sie gegenüber der Oxidation vernachlässigbar ist. Der durch reine Verdampfung freigesetzte Kohlenstoff bildet auch CH_i–Moleküle, da die C–Atome mit dem reichlich vorhandenen H_2 reagieren (die injizierten C_i–Moleküle ($i > 1$) spielen keine Rolle). Die CH_i–Bildung erfolgt durch die folgenden Reaktionen:

$$\begin{array}{lclcl} C & + & H_2 & \longleftrightarrow & CH & + & H \\ CH & + & H_2 & \longleftrightarrow & CH_2 & + & H \\ CH_2 & + & H_2 & \longleftrightarrow & CH_3 & + & H \\ CH_3 & + & H_2 & \longleftrightarrow & CH_4 & + & H\,. \end{array} \tag{IX}$$

CH_2 und CH_3 (Methyl) reagieren auch mit dem in der Gasphase reichlich vorhandenen Wasser durch die H–Abstraktionsreaktionen:

$$\begin{array}{lclclcl} CH_2 & + & H_2O & \longrightarrow & OH & + & CH_3 \\ CH_3 & + & H_2O & \longrightarrow & OH & + & CH_4\,. \end{array} \tag{X}$$

Diese Reaktionen sind auch ein Weg zu CH_4. Sie sind allerdings langsamer als (IX).

Eine Oxidation der CH_i–Moleküle findet durch Reaktionen mit O und OH statt und ist einer der möglichen Reaktionswege dieser Moleküle zum CO. Wir haben die folgenden Reaktionen:

$$\begin{array}{lclclcl} CH & + & OH & \longrightarrow & HCO & + & H \\ CH_2 & + & OH & \longrightarrow & H_2CO & + & H\,. \end{array} \tag{XI}$$

Mit freien O–Atomen können folgende Reaktionen stattfinden:

$$\begin{array}{lclclcl} CH & + & O & \longrightarrow & OH & + & C \\ & & & \longrightarrow & CO & + & H \\ CH_2 & + & O & \longrightarrow & HCO & + & H \\ CH_3 & + & O & \longrightarrow & H_2CO & + & H \\ CH_4 & + & O & \longrightarrow & CH_3 & + & OH\,. \end{array} \tag{XII}$$

Die dabei gebildeten Moleküle H_2CO (Formaldehyd) und HCO (Formyl) reagieren weiter. HCO kann hauptsächlich mit H durch die Reaktion

$$HCO + H \longrightarrow CO + H_2 \tag{XIII}$$

zum CO reagieren. H_2CO kann ebenfalls mit H reagieren. Dabei entsteht ein Formylradikal

$$H_2CO + H \longrightarrow HCO + H_2\,, \tag{XIV}$$

das nach (XIII) weiter zum CO reagiert.

In diesem Radiusbereich beobachten wir auch die Bildung des Moleküls C_2H_4 (Ethylen). Es bildet sich durch die Kondensationsreaktion zwischen zwei Methylradikalen

$$CH_3 + CH_3 \longrightarrow C_2H_4 + H_2 \qquad \text{(XV)}$$

oder zwischen einem Methyl– und einem Methylenradikal

$$CH_3 + CH_2 \longrightarrow C_2H_4 + H\,. \qquad \text{(XVI)}$$

Moleküle der Art C_2H_i reagieren mit H und liefern C_2H_{i-1}:

$$C_2H_i + H \longrightarrow C_2H_{i-1} + H_2\,. \qquad \text{(XVII)}$$

Am Ende dieser Kette steht das Molekül C_2H (Ethynyl), das schließlich mit OH reagiert und CO bildet:

$$C_2H + OH \longrightarrow CO + CH_2\,. \qquad \text{(XVIII)}$$

Abb. 10 und 15 zeigen, daß die Bildung der CH_i–Moleküle schneller ist als ihre Zerstörung, solange der chemische Abbau der Kohlenstoffteilchen stattfindet. Dadurch sammelt sich zunächst der bei der Oxidation des Kohlenstoffstaubs freigesetzte Kohlenstoff, der nicht in der Reaktion (VIII) sofort CO gebildet hat, hauptsächlich im CH_4 und CH_3 an. Erst wenn mit zunehmender Temperatur das Gleichgewicht zwischen CH_3 und CH_4 entsprechend der Reaktionen (IX) sich zu genügend hohen CH_3–Dichten verschoben hat, setzen die Kondensationsreaktionen (XV) und (XVI) mit ausreichender Rate ein, sodaß dann rasch das CH_2 und das CH_3 in CO umgewandelt werden.

Ein weiter möglicher Reaktionspfad zur CO–Bildung wäre:

$$CH_2 + O \longrightarrow CO + H + H\,. \qquad \text{(XIX)}$$

Diese Reaktion ist viel langsamer als die Reaktion mit H aber sie kann schneller zum CO führen, als die Reaktion über Formyl.

Die Hauptreaktionen des C–Systems bei ca. 1 AE ($T_c \approx 1000\,\mathrm{K}$) sind in Abb. 27 dargestellt.

CO_2 (Kohlendioxid) wird im Bereich zwischen der Venusbahn und 0.1 AE ($T_c \approx 2500\,\mathrm{K}$) in erheblichen Mengen gebildet. Dieses Molekül entsteht durch Reaktion zwischen CO und OH:

$$CO + OH \longrightarrow CO_2 + H\,. \qquad \text{(XX)}$$

Diese Reaktion ist relativ langsam und ein kleiner Teil des CO wird dadurch in CO_2 umgewandelt. CO_2 kann auch umgekehrt durch Reaktion mit H_2 wieder zum CO reduziert werden:

$$CO_2 + H_2 \longrightarrow CO + H_2O\,. \qquad \text{(XXI)}$$

Diese Reaktion ist aber in dem berücksichtigten Bereich viel langsamer als (XX), sodaß hierdurch fast kein CO gebildet wird. Wie man sieht, wird die CO_2–Bildung richtig effektiv, sobald durch H_2O–Dissoziation beträchtliche Mengen von OH gebildet werden.

Ab ca. 0.5 AE ($T_c \approx 1700\,\mathrm{K}$) setzt die Zersetzung der Olivinteilchen ein. Die letzten Olivinteilchen verschwinden bei ca. 0.13 AE ($T_c \approx 1950\,\mathrm{K}$). Die Temperatur ist in diesem ganzen Bereich näherungsweise konstant (siehe Abb. 25). Aus diesem Grund verlaufen die verschiedenen Kurven approximativ parallel: Es bildet sich ein Gleichgewicht zwischen den Spezies durch die bei dieser Temperatur möglichen Reaktionen heraus. Erst ab ca. 0.13 AE (also wenn die letzten Olivinteilchen verschwunden sind) steigt die Temperatur wieder an und weitere Reaktionen werden durch die zunehmende Temperatur kinetisch möglich. Die chemische Zusammensetzung der Materie in dieser Region (im inneren Teil der protoplanetaren Scheibe, zwischen 0.13 und 0.025 AE) zeigt Abb. 11.

CO verschwindet als letztes Molekül durch Stoßdissoziation mit H_2 und H bei ca. 0.06 AE:

$$\begin{array}{ccccccccc} CO & + & H_2 & \longrightarrow & C & + & O & + & H_2 \\ CO & + & H & \longrightarrow & C & + & O & + & H\,. \end{array} \qquad \text{(XXII)}$$

H spielt dabei die Hauptrolle, da die Wasserstoffdissoziation bei etwa 0.09 AE stattfindet. Die CO–Dissoziation führt zu einer Zunahme der C– und O–Konzentrationen in der Gasphase.

CO_2 wird bei etwa 0.08 AE ($T_c \approx 3000\,\mathrm{K}$) abgebaut. Mehrere Reaktionen sind dafür verantwortlich. Zum einen reagiert CO_2 mit H oder H_2 in schnellen Reaktionen und führt direkt zum CO:

$$\begin{array}{cccccc} CO_2 & + & H & \longrightarrow & OH & + & CO \\ & + & H_2 & \longrightarrow & H_2O & + & CO\,. \end{array} \qquad \text{(XXIII)}$$

Zum anderen kann CO_2 auch durch Reaktion mit molekularem Wasserstoff CH_2 erzeugen:

$$CO_2 + H_2 \longrightarrow CH_2 + O_2\,. \qquad \text{(XXIV)}$$

Diese Reaktion ist nicht so schnell wie die Reaktionen, die zum CO führen, aber die CH_2–Zunahme ist gut zu beobachten.

Durch die Dissoziation von CO werden C–Atome in die Gasphase injiziert. Diese Atome reagieren dann in einer komplexen Chemie, deren Hauptreaktionen die gleichen wie in Abb. 27 (bei ca. $s = 1\,\mathrm{AE}$) sind.

Allerdings waren zwei Reaktionen im Bereich $s \approx 1\,\mathrm{AE}$ kinetisch verboten, die jetzt aktiv sind: die Stoßdissoziation vom Methan durch H_2

$$CH_4 + H_2 \longrightarrow CH_3 + H + H_2 \qquad \text{(XXV)}$$

und die H_2–Abstraktionsreaktion vom Methyl (CH_3) mit OH

$$OH + CH_3 \longrightarrow CH_2 + H_2O\,. \qquad \text{(XXVI)}$$

Die Stoßdissoziation verhindert die Methanbildung. Die Abstraktionsreaktion erklärt die relativ hohe CH–Konzentration: das Methan wird dissoziiert und liefert CH_3, das durch OH zum CH_2 umgewandelt wird. CH_2 reagiert wiederum mit OH und liefert CH:

$$OH + CH_2 \longrightarrow CH + H_2O\,. \qquad \text{(XXVII)}$$

C_2 entsteht als Zwischenprodukt durch Reaktion zwischen C und CH

$$C + CH \longleftrightarrow C_2 + H \qquad \text{(XXVIII)}$$

und erreicht ein Maximum bei ca. 0.05 AE (wie alle C_mH_n–Moleküle). Es verschwindet dann wieder durch Reaktion mit H (Rückreaktion).

Moleküle der Art C_mH_n treten, wie bei 1 AE (siehe Abb. 27), auch in diesem Bereich als Zwischenprodukte auf. Die daran beteiligten Reaktionen sind die gleichen. Bei 0.05 AE hat man $n_{CH_3} \approx 3 \cdot 10^9\,\mathrm{cm}^{-3}$, $n_{C_2H_4} \approx 10^3\,\mathrm{cm}^{-3}$ und $n_{C_2H_5} \approx 10\,\mathrm{cm}^{-3}$. Aus diesem Grund sind diese beiden letzten Moleküle in Abb. 11 nicht zu sehen.

Alle CH–Bindungen dissoziieren durch Stoßdissoziation in C und H ab 0.05 AE. Die Bildung von CO ist in diesem Bereich nicht mehr möglich, da CO selbst durch Stoßdissoziation mit H und H_2 verschwindet.

Ionenchemie:
Bei einem Abstand von ca. $s = 11\,\mathrm{AE}$ ($T_c \approx 100\,\mathrm{K}$) erreicht das Ion C^+ eine Teilchendichte von ca. $10^9\,\mathrm{cm}^{-3}$. Die einzige Kohlenstoffquelle in diesem Bereich ist das CO–Molekül. Wie man sieht, entsteht C^+ in großen Mengen, sobald die komplette Verdampfung des CO–Eises stattgefunden hat. Der erste Schritt ist die Bildung von CO^+, da CO in diesem Bereich wegen der tiefen Temperaturen nicht thermisch dissoziiert werden kann. Für die Bildung des CO^+ sind drei Wege möglich:

1) CO^+ kann als Folge der direkten Ionisation von CO durch kosmische Strahlung entstehen (VII). Die Bindungsenergie von CO^+ (8.34 eV) ist kleiner als die von CO und eine dissoziative Rekombination kann stattfinden (siehe Kap. 4.2.3). Die hierdurch gebildeten C–Atome werden durch die kosmische Strahlung ionisiert:

$$C + \mathrm{c.r.} \longrightarrow C^+ + e^- . \qquad \text{(XXIX)}$$

2) Ein anderer Weg zur C^+–Bildung erfolgt über das Ion ${H_2}^+$. Der molekulare Wasserstoff wird zuerst von der kosmischen Strahlung (IV) und den radioaktiven Kernen ionisiert. ${H_2}^+$ reagiert durch Ladungsaustauschreaktion mit CO und bildet CO^+ und H_2 (Kap. 4.2.3) und schließlich C^+ nach dem beschriebenen Weg.

3) C^+ kann durch Reaktionen mit He^+ entstehen. Helium wird zuerst von der kosmischen Strahlung (VI) und den radioaktiven Kernen ionisiert. Wenn He^+ mit CO reagiert, bildet sich sofort C^+:

$$He^+ + CO \longrightarrow C^+ + O + He . \qquad \text{(XXX)}$$

C^+ und die Elektronen verschwinden bei ca. 11 AE ziemlich rasch. C^+ reagiert hier mit dem Wasser, das bei ca. 110 K anfängt zu verdampfen, und bildet zunächst das Ion HCO^+:

$$C^+ + H_2O \longrightarrow HCO^+ + H . \qquad \text{(XXXI)}$$

Eine dissoziative Rekombination zwischen HCO^+ und den Elektronen bildet dann CO:

$$HCO^+ + e^- \longrightarrow CO + H . \qquad \text{(XXXII)}$$

Alternativ ist es auch möglich, daß HCO^+ mit dem Wasser reagiert. Dabei wird das Ion H_3O^+ gebildet:

$$HCO^+ + H_2O \longrightarrow H_3O^+ + CO . \qquad \text{(XXXIII)}$$

Eine dissoziative Rekombination zwischen H_3O^+ und den Elektronen führt entweder zum Wasser zurück

$$H_3O^+ + e^- \longrightarrow H_2O + H \qquad \text{(XXXIV)}$$

oder zum OH

$$H_3O^+ + e^- \longrightarrow OH + H + H\,. \tag{XXXV}$$

Der direkte Weg von HCO^+ zum CO durch dissoziative Rekombination ist aber der wirksamste Mechanismus.

Der atomare Wasserstoff zeigt einen kleinen Peak bei etwa 11 AE. Dieser wird durch die Reaktionen (XXXI) und (XXXII) verursacht, die H in die Gasphase injizieren. Nachdem alle Ionen C^+ verschwunden sind, geht die Häufigkeit des H wieder zurück und der quasistationäre Gleichgewichtszustand zwischen H_2 und H kann sich wieder einstellen (Kap. 7.1).

Die Kohlenstoffchemie wird in der ganzen Scheibe durch die Ionisationsprozesse nicht merklich beeinflußt (abgesehen vom Bereich zwischen 22 und 11 AE, in dem etwa 1% der C–Atome ionisiert und nicht als CO anwesend sind). Die obigen Schlußfolgerungen bzgl. der neutralen Chemie sind auch hier gültig.

7.4.2 Das OH–System

neutrale Chemie:
Die neutralen Spezies dieses Systems sind H_2, H, H_2O, OH, O, O_2, HO_2 und H_2O_2. H_2O ist das Hauptmolekül. Bis ca. 1.6 AE bleibt die Teilchendichte des Wassers konstant. Dann fängt H_2 langsam an zu dissoziieren und liefert H in die Gasphase. H reagiert sofort mit H_2O:

$$H_2O + H \longrightarrow OH + H_2\,. \tag{XXXVI}$$

Die umgekehrte Reaktion

$$H_2 + OH \longrightarrow H + H_2O \tag{XXXVII}$$

ist allerdings viel schneller, sodaß die OH–Dichte, außer im Bereich der H_2–Dissoziation, immer relativ klein bleibt. Das freigesetzte OH wird für die Kohlenstoffoxidation verbraucht. Dies führt dann zur einer Abnahme der Wasserteilchendichte. Sobald die letzten Kohlenstoffteilchen verschwunden sind, setzt ein Gleichgewicht zwischen den Zersetzungsprodukten der Olivinteilchen und den verschiedenen Spezies der Gasphase ein. Die wichtigsten Reaktionen dieses Systems bei ca. 1 AE sind in Abb. 28 dargestellt.

Die Zersetzung der Olivinteilchen (effektiv ab 0.5 AE) liefert u.a. O in die Gasphase. O reagiert sehr schnell mit H_2:

$$O + H_2 \longrightarrow OH + H\,. \tag{XXXVIII}$$

O kann auch mit OH zum O_2 reagieren:

$$OH + O \longrightarrow O_2 + H\,. \tag{XXXIX}$$

O_2 kann seinerseits mit H und H_2 reagieren. Zwei Reaktionen sind in diesem Fall von Bedeutung:

$$O_2 + H_2 \longrightarrow OH + OH \tag{XL}$$

und

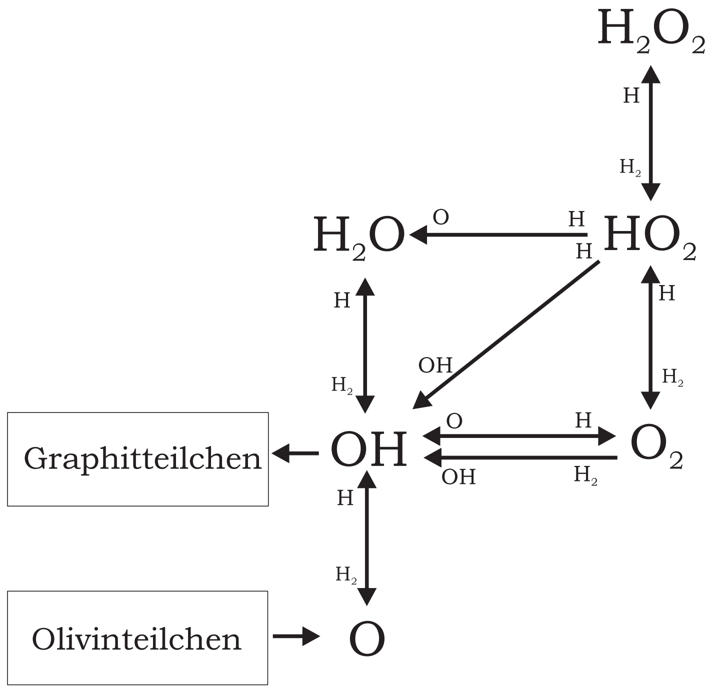

Abbildung 28: *Hauptreaktionen des* OH*–Systems bei ca. 1 AE.*

$$O_2 + H \longrightarrow OH + O\,. \qquad \text{(XLI)}$$

Diese letzte Reaktion hat jedoch eine hohe Aktivierungsenergie und spielt aus diesem Grund keine große Rolle.

Die seltenen Moleküle HO_2 (Hydroperoxyl) und H_2O_2 (Peroxid) werden in kleinen Mengen gebildet (nur einige Teilchen/cm^3). HO_2 entsteht hauptsächlich durch Reaktion zwischen O_2 und H_2:

$$O_2 + H_2 \longrightarrow HO_2 + H\,. \qquad \text{(XLII)}$$

H und OH können wegen ihrer hohen Häufigkeit nach den folgenden Reaktionen HO_2 abbauen:

$$\begin{array}{lllllll} HO_2 & + & H & \longrightarrow & OH & + & OH \\ & & & \longrightarrow & H_2O & + & O \\ & & & \longrightarrow & H_2 & + & O_2 \\ HO_2 & + & OH & \longrightarrow & H_2O & + & O_2\,. \end{array} \qquad \text{(XLIII)}$$

Die Bildung von H_2O_2 erfolgt durch Reaktion zwischen HO_2 und H_2:

$$HO_2 + H_2 \longleftrightarrow H_2O_2 + H \qquad \text{(XLIV)}$$

oder in einer langsameren Reaktion zwischen HO_2 und H_2O:

$$HO_2 + H_2O \longrightarrow H_2O_2 + OH\,. \qquad \text{(XLV)}$$

Peroxid wird durch Reaktion mit H (Rückreaktion von (XLIV)) abgebaut.

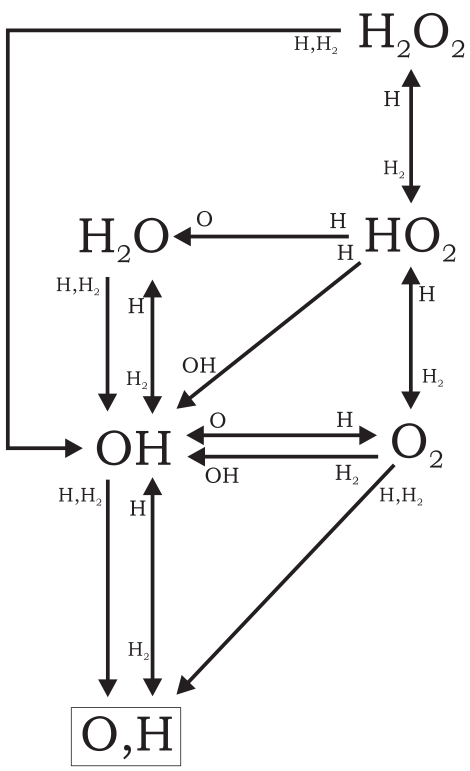

Abbildung 29: *Hauptreaktionen des* OH*–Systems bei ca. 0.05 AE.*

Im inneren Teil der Scheibe (Abb. 11) dissoziieren ab 0.08 AE alle OH–Verbindungen. Es existiert kein Staub mehr, sodaß OH nicht mehr verbraucht und O nicht mehr erzeugt wird. Die Wasserdissoziation erfolgt in dieser Region hauptsächlich durch Stoßdissoziation mit H und H_2. Dabei wird OH erzeugt, das wiederum durch Stoßdissoziation verschwindet.

$$\begin{array}{lllllllll} H_2O & + & H & \longrightarrow & OH & + & H & + & H \\ H_2O & + & H_2 & \longrightarrow & OH & + & H & + & H_2 \end{array} \qquad \text{(XLVI)}$$

und

$$\begin{array}{lllllllll} OH & + & H & \longrightarrow & H & + & O & + & H \\ OH & + & H_2 & \longrightarrow & H & + & O & + & H_2\,. \end{array} \qquad \text{(XLVII)}$$

Derselbe Prozeß gilt auch für O_2 und H_2O_2:

$$\begin{array}{lllllllll} O_2 & + & H & \longrightarrow & O & + & O & + & H \\ O_2 & + & H_2 & \longrightarrow & O & + & O & + & H_2 \end{array} \qquad \text{(XLVIII)}$$

und

$$\begin{array}{lllllllll} H_2O_2 & + & H & \longrightarrow & OH & + & OH & + & H \\ H_2O_2 & + & H_2 & \longrightarrow & OH & + & OH & + & H_2\,. \end{array} \qquad \text{(XLIX)}$$

Abb. 29 zeigt die Hauptreaktionen des OH–Systems bei ca. 0.05 AE. OH zeigt ein kleines Plateau bei etwa 0.05 AE. Die OH–Konzentration nimmt hier aufgrund der CO–Dissoziation leicht zu. Der dabei freigesetzte Sauerstoff reagiert mit H_2 nach (XXXVIII) und bildet OH. Durch Reaktion mit H_2 (XXXVII) wird kurz Wasser gebildet. Die beiden

Moleküle verschwinden aber wieder rasch.

Ionenchemie:
Die Ionenchemie beeinflußt dieses System praktisch nicht. Zwischen 22 und 11 AE, parallel zu C^+, ist auch H^+ zu beobachten. H^+ entsteht bei der Ionisation von H_2 und H durch die kosmische Strahlung ((IV) und (V)). Die Ionisation von H_2 führt zum Ion $H_2{}^+$ (III), das durch Ladungsaustausch mit H das Ion H^+ erzeugt:

$$\mathrm{H_2}^+ + \mathrm{H} \longleftrightarrow \mathrm{H}^+ + \mathrm{H_2}\,. \tag{L}$$

H^+ verschwindet bei ca. 11 AE ziemlich rasch. Die Ursache dafür ist auch hier eine Ladungsaustauschreaktion mit H_2O:

$$\mathrm{H}^+ + \mathrm{H_2O} \longrightarrow \mathrm{H} + \mathrm{H_2O}^+\,. \tag{LI}$$

H_2O^+ reagiert mit H_2 und liefert H_3O^+:

$$\mathrm{H_2O}^+ + \mathrm{H_2} \longrightarrow \mathrm{H_3O}^+ + \mathrm{H}\,. \tag{LII}$$

Die dissoziativen Rekombinationen (XXXIV) und (XXXV) führen dann direkt zum Wasser oder zum OH. OH kann allerdings auch mit sich selbst reagieren und zum H_2O führen:

$$\mathrm{OH} + \mathrm{OH} \longleftrightarrow \mathrm{H_2O} + \mathrm{O}\,. \tag{LIII}$$

Im restlichen Teil der Scheibe sind nur wenig Ionen vorhanden. H_3O^+ erreicht unter allen Ionen des OH–Systems die größte Häufigkeit, aber diese erreicht nicht mehr als ca. $100\,\mathrm{cm}^{-3}$ (verglichen mit einer H_2–Häufigkeit von $10^{12}\,\mathrm{cm}^{-3}$).

7.4.3 Das N–System

Dieses System ist wahrscheinlich das interessanteste überhaupt, weil die Ionenchemie einen entscheidenden Einfluß auf die neutrale Chemie hat. Deshalb wollen wir im Gegensatz zu dem C– und OH–System die neutrale Chemie und die Ionenchemie zusammen behandeln.

Das wichtigste Molekül dieses Systems ist N_2. Es enthält anfangs den ganzen verfügbaren Stickstoff. N_2 ist somit die einzige Quelle für die Bildung von stickstoffhaltigen Molekülen. Wir erhalten am Außenrand der Scheibe eine hohe Dichte an freien N–Atomen. Diese freien Atome waren in einer Modellrechnung ohne Berücksichtigung der Ionisationsprozesse nicht zu beobachten [Bauer *et al.* 1996]. Bei der neutralen Chemie ist kein Prozeß in der Lage, die N_2–Moleküle aufzubrechen. Das ist bei der Anwesenheit ionisierender Strahlung nicht mehr der Fall. Ab ca. 25 AE ($T_c \approx 25\,\mathrm{K}$) stellen wir fest, daß etwa die Hälfte der verfügbaren N–Atome als freie Atome anwesend sind. Diese Atome stehen dann für weitere chemische Reaktionen zur Verfügung.

Die einzige Reaktion, die in unserem Modell in der Lage ist, die N_2–Bindung aufzubrechen ist die Reaktion zwischen N_2 und dem Ion He^+ (also kein Wunder, daß freie N–Atome in unserer Atmosphäre nicht existieren !):

$$\mathrm{N_2} + \mathrm{He}^+ \longrightarrow \mathrm{N}^+ + \mathrm{N} + \mathrm{He}\,. \tag{LIV}$$

He^+ entsteht, wie bereits erwähnt, als Produkt der He–Ionisation durch kosmische Strahlung (VI) und radioaktive Kerne. Alternativ kann N^+ auch direkt durch die Ionisation von N durch die kosmische Strahlung gebildet werden:

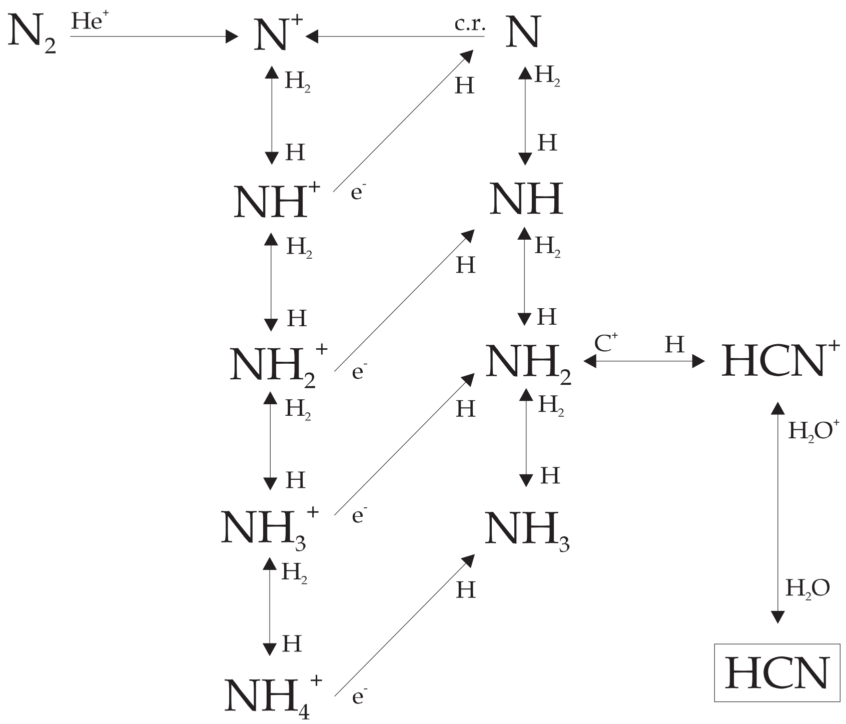

Abbildung 30: *Hauptreaktionen des* N*–Systems zwischen ca. 10 und 2 AE (Weg zum* HCN*).*

$$\mathrm{N} + \mathrm{c.r.} \longrightarrow \mathrm{N}^+ + \mathrm{e}^- \,. \tag{LV}$$

Reaktion (LIV) ist aufgrund der hohen Heliumdichte besonders ergiebig. In Abb. 9 sieht man, daß ab 11 AE bei der Freisetzung des Wassers HCN (Cyanid) entsteht. Der allererste Schritt ist die Ionisation der freien N–Atome durch die kosmische Strahlung (LV) oder durch die N_2–Dissoziation (LIV). Ein möglicher Weg zur Cyanidbildung könnte die folgende Reaktionskette sein:

$$\begin{array}{lclclcl} \mathrm{N}^+ & + & \mathrm{H}_2 & \longleftrightarrow & \mathrm{NH}^+ & + & \mathrm{H} \\ \mathrm{NH}^+ & + & \mathrm{H}_2 & \longleftrightarrow & \mathrm{NH_2}^+ & + & \mathrm{H} \\ \mathrm{NH_2}^+ & + & \mathrm{H}_2 & \longleftrightarrow & \mathrm{NH_3}^+ & + & \mathrm{H} \\ \mathrm{NH_3}^+ & + & \mathrm{H}_2 & \longleftrightarrow & \mathrm{NH_4}^+ & + & \mathrm{H}\,. \end{array} \tag{LVI}$$

Die verschiedenen Ionen dieser Kette können durch Reaktionen mit Elektronen dissoziativ rekombinieren. Dabei entstehen die Moleküle NH, NH_2 und NH_3. NH_2 reagiert mit dem Ion C^+ und erzeugt HCN^+:

$$\mathrm{NH}_2 + \mathrm{C}^+ \longrightarrow \mathrm{HCN}^+ + \mathrm{H}\,. \tag{LVII}$$

Ladungsaustauschreaktionen können zwischen HCN^+ und H, HCN^+ und O oder besonders zwischen HCN^+ und H_2O stattfinden und liefern HCN:

$$\begin{array}{lclclcl} \mathrm{HCN}^+ & + & \mathrm{H} & \longleftrightarrow & \mathrm{HCN} & + & \mathrm{H}^+ \\ & + & \mathrm{O} & \longleftrightarrow & \mathrm{HCN} & + & \mathrm{O}^+ \\ & + & \mathrm{H_2O} & \longleftrightarrow & \mathrm{HCN} & + & \mathrm{H_2O}^+\,. \end{array} \tag{LVIII}$$

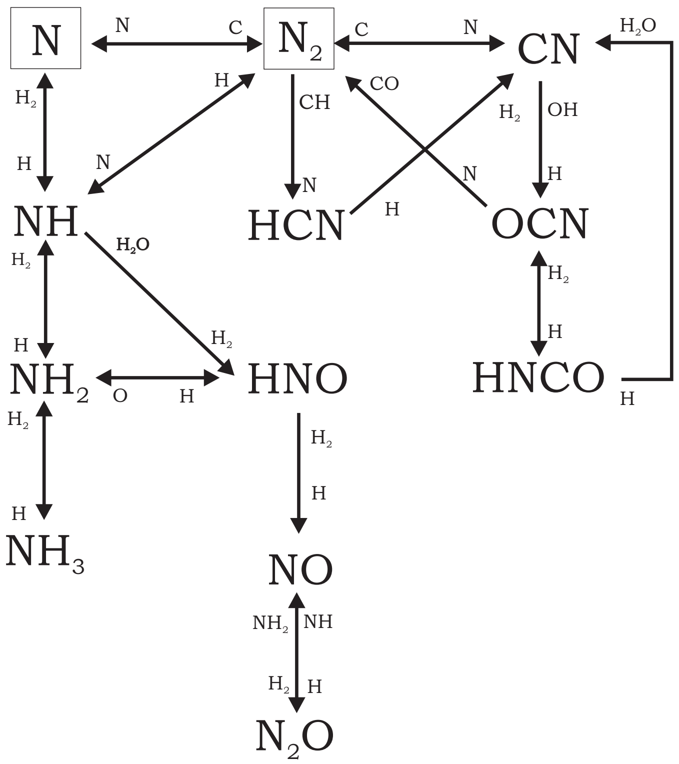

Abbildung 31: *Hauptreaktionen des* N*–Systems bei ca. 1 AE.*

Die letzte Reaktion ist die wirksamste. Deshalb bildet sich Cyanid dort, wo das Wassereis verdampft. Selbst wenn freie N–Atome in der Gasphase anwesend wären, könnte HCN ohne Ionisationsprozesse nicht entstehen. Die Bildung von Cyanid erfolgt, wie wir gerade gesehen haben, nur über die Bildung von NH_2. Dieses Molekül bildet sich in der neutralen Chemie hauptsächlich nach dem Schema:

$$\begin{array}{lclcl} N & + & H_2 & \longleftrightarrow & NH & + & H \\ NH & + & H_2 & \longleftrightarrow & NH_2 & + & H \\ NH_2 & + & H_2 & \longleftrightarrow & NH_3 & + & H\,. \end{array} \tag{LIX}$$

Die erste Reaktion in dieser Kette (Bildung von NH durch Reaktion zwischen N und H_2) hat eine hohe Aktivierungsenergie (10 700 K) und ist deswegen in dem Bereich zwischen dem Außenrand der Scheibe und $\approx$ 8 AE ($T_c \approx 200$ K) kinetisch verboten. Die Ionisationsprozesse liefern aber eine Möglichkeit, diesen Engpaß zu umgehen und erlauben die Bildung von großen NH_2–Mengen und schließlich von Cyanid. Abb. 30 zeigt die Hauptreaktionen, die zur Cyanidbildung führen.

Ein Teil der freien N–Atome verschwindet ab ca. 5 AE ($T_c \approx 280$ K) und rekombiniert zum N_2. NH_2 reagiert zunächst mit H und bildet NH:

$$NH_2 + H \longleftrightarrow NH + H_2\,. \tag{LX}$$

NH reagiert dann mit N wieder in einer schnellen Reaktion und liefert N_2:

$$NH + N \longrightarrow N_2 + H\,. \tag{LXI}$$

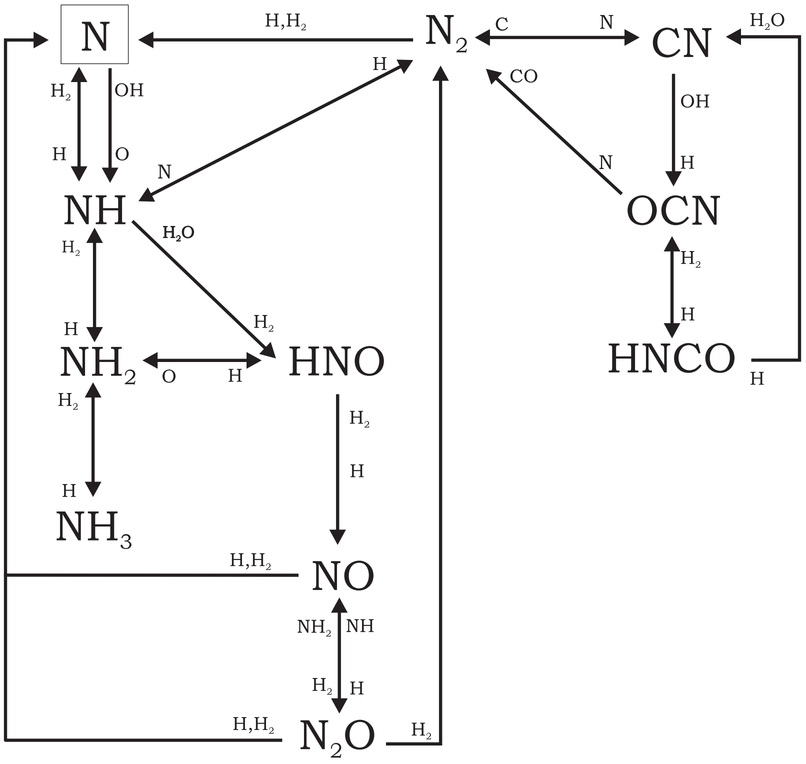

Abbildung 32: *Hauptreaktionen des* N*–Systems bei ca. 0.05 AE.*

Wir beobachten die Bildung von Ammoniak als Zwischenprodukt. Wie beim Methan wird das Maximum bei ca. 1 AE erreicht, d.h. *wo die Erde sich heutzutage befindet.* Dies ist auch eine direkte Konzequenz der N_2–Ionisation durch He^+. Die gebildeten Ionen N^+ reagieren nach (LVI) und bilden NH_3 durch dissoziative Rekombinationen. Nach unserem Modell ist die Erde in einer Region entstanden, in der hohe Konzentrationen von Methan, Cyanid und Ammoniak anwesend waren. Wiederum sind in unserer Modellrechnung ausschließlich die Ionisationsprozesse für diese hohen Ammoniakkonzentrationen verantwortlich.

HCN verschwindet ab 0.8 AE ($T_c \approx 1300$ K), d.h. dort, wo die Zersetzung der Olivinteilchen richtig effektiv wird. Mehrere Reaktionen können dafür verantwortlich sein. Die Reaktionen zwischen Cyanid und He^+, O^+ oder CO^+ haben zwar niedrige Aktivierungsenergien aber die Spezies He, O und CO müssen erst einmal ionisiert werden. Auf der anderen Seite kann HCN mit OH oder O reagieren. Diese Reaktionen haben niedrige Aktivierungsenergien, die bei den im entsprechenden Gebiet herrschenden Temperaturen ($\approx$ 1000 K) keine große Rolle spielen. Da HCN dann verschwindet, wenn die Zersetzung der Olivinteilchen richtig effektiv wird, ist zu erwarten, daß die dabei freigesetzten O–Atome von großer Bedeutung sind. Reaktionen zur Vernichtung der Cyanidmoleküle sind:

$$\begin{array}{lllllll} \mathrm{HCN} & + & \mathrm{O} & \longleftrightarrow & \mathrm{OH} & + & \mathrm{CN} \\ & & & \longleftrightarrow & \mathrm{OCN} & + & \mathrm{H} \\ & & & \longleftrightarrow & \mathrm{CO} & + & \mathrm{NH}\,. \end{array} \tag{LXII}$$

Die dritte Reaktion ist die wichtigste. Das gebildete NH reagiert nach der Kette (LIX) und bildet wieder Ammoniak.

NO (Stickstoffoxid) wird ebenfalls als Zwischenprodukt gebildet (Abb. 17). Die NO–Konzentration erreicht $7 \cdot 10^8\,\mathrm{cm}^{-3}$. NO bildet sich, wenn HNO mit H reagiert:

$$\mathrm{HNO + H \longrightarrow NO + H_2}\,. \tag{LXIII}$$

Der schnellste Weg zur HNO–Bildung ist die Reaktion zwischen Wasser und NH:

$$\mathrm{H_2O + NH \longrightarrow HNO + H_2}\,. \tag{LXIV}$$

Eine Reaktion zwischen NH_2 und O ist auch möglich:

$$\mathrm{NH_2 + O \longrightarrow HNO + H}\,. \tag{LXV}$$

Die kleine Abnahme in der Teilchendichte von NO bei ca. 0.9 AE ($T_c \approx 1100\,\mathrm{K}$) wird durch die Reaktion mit dem injizierten Schwefel verursacht:

$$\mathrm{S + NO \longleftrightarrow SO + N}\,. \tag{LXVI}$$

Die Unregelmäßigkeit im Verlauf der Ammoniakhäufigkeit bei 0.8 AE hat ihre Ursache in einer Reaktion zwischen N und HS:

$$\mathrm{N + HS \longleftrightarrow NH + S}\,. \tag{LXVII}$$

Dabei wird NH injiziert, das sofort nach (LIX) zum NH_3 reagiert.

Abb. 13 zeigt, daß kleine NH_4^+–Mengen im inneren Teil der Scheibe anwesend sind. Dieses Molekül ist das Endprodukt der Kette (LVI). NH_4^+ verschwindet ab ca. 0.04 AE ($T_c \approx 5700\,\mathrm{K}$) durch zwei mögliche dissoziative Rekombinationen:

$$\begin{array}{llllllll} \mathrm{NH_4^+} & + & \mathrm{e^-} & \longrightarrow & \mathrm{NH_3} & + & \mathrm{H} & \\ & & & \longrightarrow & \mathrm{NH_2} & + & \mathrm{H} & + \;\mathrm{H}\,. \end{array} \tag{LXVIII}$$

Geringe Mengen von Molekülen wie OCN, HNCO und N_2O werden ebenfalls produziert. OCN entsteht z.B. durch Reaktion zwischen OH und CN:

$$\mathrm{OH + CN \longrightarrow OCN + H} \tag{LXIX}$$

und wird durch Reaktion mit H_2 zum HNCO:

$$\mathrm{OCN + H_2 \longrightarrow HNCO + H}\,. \tag{LXX}$$

Dieses Molekül kann mit H reagieren und CN produzieren:

$$\mathrm{HNCO + H \longrightarrow H_2O + CN}\,. \tag{LXXI}$$

N_2O (Distickstoffoxid) kann durch Reaktionen von NH mit NO

$$\mathrm{NH + NO \longrightarrow N_2O + H} \tag{LXXII}$$

oder von NH_2 mit NO

$$\mathrm{NH_2 + NO \longrightarrow N_2O + H_2} \tag{LXXIII}$$

produziert werden.

N_2 wird bei einigen Reaktionen auch zurückgebildet. Die wichtigsten dieser Reaktionen sind:

$$CN + N \longrightarrow N_2 + C \tag{LXXIV}$$

$$NH + N \longrightarrow N_2 + H \tag{LXXV}$$

$$NH + NH \longrightarrow N_2 + H_2 \tag{LXXVI}$$

$$N + OCN \longrightarrow N_2 + CO \tag{LXXVII}$$

und

$$NH + NO \longrightarrow N_2 + OH\,. \tag{LXXVIII}$$

Abb. 31 zeigt die Hauptreaktionen des N–Systems bei 1 AE.

Im inneren Teil der Scheibe (Abb. 11 und 22) verschwindet N_2 ab 0.08 AE durch Stoßdissoziation mit H und H_2.

$$\begin{array}{llllllll} N_2 & + & H & \longrightarrow & N & + & N & + & H \\ N_2 & + & H_2 & \longrightarrow & N & + & N & + & H_2\,. \end{array} \tag{LXXIX}$$

HCN und NO verschwinden bei diesem Abstand ebenfalls schnell. HCN reagiert mit O (LXII) oder mit OH und liefert CN in die Gasphase:

$$HCN + OH \longrightarrow H_2O + CN\,. \tag{LXXX}$$

CN wird durch Reaktion mit O

$$\begin{array}{llllll} CN & + & O & \longrightarrow & NO & + & C \\ & & & \longrightarrow & CO & + & N \end{array} \tag{LXXXI}$$

oder mit N

$$CN + N \longrightarrow N_2 + C \tag{LXXXII}$$

abgebaut.

Der Hauptzerstörungsprozeß für NO ist die Reaktion mit dem freigesetzten Stickstoff:

$$NO + N \longrightarrow N_2 + O\,. \tag{LXXXIII}$$

NO wird auch durch Stoßdissoziation mit H_2 abgebaut:

$$NO + H_2 \longrightarrow N + O + H_2\,. \tag{LXXXIV}$$

Die NH_i–Moleküle reagieren durch Reaktionen mit H zum N (Rückreaktionen von (LIX)):

$$\begin{array}{llllll} NH_3 & + & H & \longleftrightarrow & NH_2 & + & H_2 \\ NH_2 & + & H & \longleftrightarrow & NH & + & H_2 \\ NH & + & H & \longleftrightarrow & N & + & H_2\,. \end{array} \tag{LXXXV}$$

OH reagiert mit dem freigesetzten Stickstoff und erzeugt zusätzlich NH:

$$\mathrm{OH + N \longrightarrow NH + O}\,. \tag{LXXXVI}$$

Die Zunahme der NH–Häufigkeit ist deutlich zu sehen. Ein Maximum wird bei ca. 0.06 AE ($T_c \approx 4000\,\mathrm{K}$) erreicht und NH verschwindet dann endgültig nach Reaktion mit H.

Wir wollen noch die seltenen Moleküle OCN, HNCO und N_2O betrachten. OCN wird hauptsächlich durch Reaktionen mit H, H_2 oder N abgebaut. Abgesehen von den Reaktionen (LXX) und (LXXVII) ist jetzt die Reaktion zwischen OCN und H aktiv:

$$\mathrm{OCN + H \longrightarrow NH + CO}\,. \tag{LXXXVII}$$

HNCO reagiert auch mit H (LXXI) und liefert CN. Eine langsamere Reaktion ist zusätzlich vorhanden und führt zum OCN:

$$\mathrm{HNCO + H \longrightarrow OCN + H_2}\,. \tag{LXXXVIII}$$

N_2O wird durch Reaktion mit H

$$\mathrm{N_2O + H \longrightarrow OH + N_2}\,. \tag{LXXXIX}$$

oder durch Stoßdissoziation mit H_2 abgebaut:

$$\mathrm{N_2O + H_2 \longrightarrow N_2 + O + H_2}\,. \tag{XC}$$

Die Hauptreaktionen dieses Systems bei ca. 0.05 AE zeigt Abb. 32.

7.4.4 Das Si–System

neutrale Chemie:

Die Chemie der Si–haltigen Spezies wird ab ca. 1 AE aktiv, wenn die Olivinteilchen anfangen sich zu zersetzen. SiO wird in die Gasphase injiziert und ist der Ausgangspunkt der ganzen Si–Chemie. Abb. 10 zeigt, daß SiOOH das häufigste Molekül nach SiO ist. SiOOH hat eine Häufigkeit von etwa $10^{12}\,\mathrm{cm}^{-3}$ bei 0.13 AE ($T_c \approx 2000\,\mathrm{K}$) und ist dort fast so häufig wie SiO. Dessen Bildung erfolgt über die Bildung von HSiO, SiH_2O und schließlich HSiOOH. Als erstes wird HSiO gebildet, wenn SiO mit H_2, H_2O und OH reagiert:

$$\begin{array}{lllllll} \mathrm{SiO} & + & \mathrm{H_2} & \longleftrightarrow & \mathrm{HSiO} & + & \mathrm{H} \\ & + & \mathrm{H_2O} & \longleftrightarrow & \mathrm{HSiO} & + & \mathrm{OH} \\ & + & \mathrm{OH} & \longleftrightarrow & \mathrm{HSiO} & + & \mathrm{H_2O}\,. \end{array} \tag{XCI}$$

HSiO reagiert weiter mit H_2 und OH:

$$\begin{array}{lllllll} \mathrm{HSiO} & + & \mathrm{H_2} & \longleftrightarrow & \mathrm{SiH_2O} & + & \mathrm{H} \\ & + & \mathrm{OH} & \longleftrightarrow & \mathrm{SiH_2O} & + & \mathrm{O} \end{array} \tag{XCII}$$

und dann SiH_2O mit H_2O und OH:

$$\begin{array}{lllllll} \mathrm{SiH_2O} & + & \mathrm{H_2O} & \longleftrightarrow & \mathrm{HSiOOH} & + & \mathrm{H_2} \\ & + & \mathrm{OH} & \longleftrightarrow & \mathrm{HSiOOH} & + & \mathrm{H}\,. \end{array} \tag{XCIII}$$

Schließlich entsteht SiOOH als Zerfallsprodukt von HSiOOH:

$$\mathrm{HSiOOH \longleftrightarrow SiOOH + H}\,. \tag{XCIV}$$

SiO_2 ist das dritthäufigste Si–haltige Molekül bei 0.13 AE ($\approx 10^9\,\mathrm{cm}^{-3}$). Es bildet sich in der Reaktion zwischen SiO und OH:

$$\mathrm{SiO} + \mathrm{OH} \longleftrightarrow \mathrm{SiO_2} + \mathrm{H}\,. \qquad \text{(XCV)}$$

Das vierthäufigste Si–haltige Molekül bei 0.13 AE ist HSiOOH mit einer Teilchendichte von ca. $10^5\,\mathrm{cm}^{-3}$. Es bildet sich nach dem oben angegebenen chemischen Weg.

Alle Si–haltige Moleküle verschwinden im inneren Teil der Scheibe (Abb. 11) hauptsächlich in den Rückwärtsreaktionen obiger Reaktionen. HSiO wird nach (XCI) gebildet aber verschwindet auch durch Stoßdissoziation mit H und H_2:

$$\begin{array}{ccccccccc} \mathrm{HSiO} & + & \mathrm{H_2} & \longrightarrow & \mathrm{SiO} & + & \mathrm{H} & + & \mathrm{H_2} \\ & + & \mathrm{H} & \longrightarrow & \mathrm{SiO} & + & \mathrm{H} & + & \mathrm{H}\,. \end{array} \qquad \text{(XCVI)}$$

SiO verschwindet als letztes bei ca. 0.04 AE ($T_c \approx 5700\,\mathrm{K}$). Das durch Stoßdissoziation des SiO mit H und H_2 freigesetzte Si reagiert sofort mit OH und bildet erneut SiO:

$$\mathrm{Si} + \mathrm{OH} \longleftrightarrow \mathrm{SiO} + \mathrm{H}\,. \qquad \text{(XCVII)}$$

Diese Reaktion konkurriert mit den Stoßdissoziationen von SiO durch H bzw. H_2. Wären sie die einzigen Abbauprozesse für SiO, würde dieses Molekül bei ca. 0.1 AE verschwinden.

Ionenchemie:
Die Ionenchemie des Siliziums spielt praktisch keine Rolle. Einige Si^+–Ionen bilden sich bei ca. 0.8 AE. Sie entstehen hauptsächlich durch Ladungsaustauschreaktion zwischen He^+ und SiO_2. Dabei wird das molekulare Ion SiO_2^+ durch den Stoß dissoziiert:

$$\mathrm{He^+} + \mathrm{SiO_2} \longrightarrow \mathrm{Si^+} + \mathrm{O_2} + \mathrm{He}\,. \qquad \text{(XCVIII)}$$

Eine formal ähnliche Reaktion zwischen He^+ und SiO ist ebenfalls möglich:

$$\mathrm{He^+} + \mathrm{SiO} \longrightarrow \mathrm{Si^+} + \mathrm{O} + \mathrm{He}\,. \qquad \text{(XCIX)}$$

Im inneren Teil der Scheibe findet man auch SiO^+ und geringe Mengen des SiC^+. SiO^+ bildet sich, wenn Si^+ mit OH reagiert:

$$\mathrm{Si^+} + \mathrm{OH} \longrightarrow \mathrm{SiO^+} + \mathrm{H}\,. \qquad \text{(C)}$$

Eine Austauschreaktion zwischen Si^+ und CH führt hier zum SiC^+:

$$\mathrm{Si^+} + \mathrm{CH} \longrightarrow \mathrm{SiC^+} + \mathrm{H}\,. \qquad \text{(CI)}$$

Die Si^+–Häufigkeit nimmt aufgrund der Stoßdissoziation von SiO zu, wenn Si–Atome in die Gasphase injiziert werden und durch Ladungsaustauschreaktionen mit H^+ und He^+ reagieren.

7.4.5 Das S–System

neutrale Chemie:
Die berücksichtigten neutralen Spezies dieses Systems sind S, HS, SO, CS, HCS, OCS, H_2S und SO_2. Die Chemie der schwefelhaltigen Spezies wird ab ca. 1.7 AE ($T_c \approx 700\,\mathrm{K}$) aktiv, wenn die Troilitteilchen anfangen sich zu zersetzen. Wie gesagt, werden dabei S und Fe in die Gasphase injiziert. Abb. 18 zeigt, daß alle neutralen Spezies dieses Systems

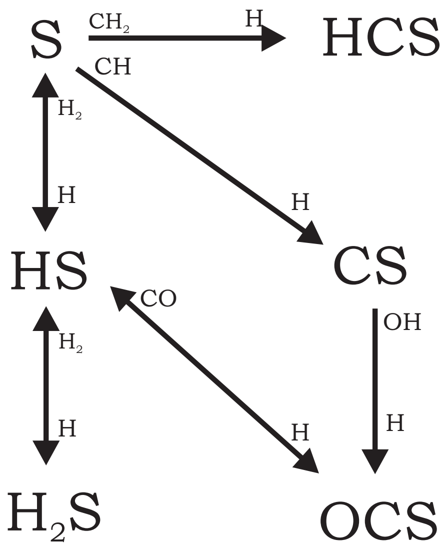

Abbildung 33: *Hauptreaktionen des* S*–Systems bei ca. 1 AE.*

in merklichen Mengen als Zwischenprodukte zwischen 1.6 und 1 AE anwesend sind (in Abb. 10 sind diese Spezies nicht zu erkennen). Sie erreichen alle das Maximum ihrer Häufigkeit bei ca. 1 AE. Wir bemerken zuerst die mäßige Menge von freien S–Atomen ($n_{\mathrm{S}} \approx 10^7\,\mathrm{cm}^{-3}$ bei 1 AE). Die injizierten Schwefelatome reagieren sehr schnell zum H_2S (Schwefelwasserstoff), das das häufigste Molekül bei 1 AE ist. Der Schwefel reagiert zuerst mit H_2 und erzeugt HS:

$$\mathrm{S} + \mathrm{H_2} \longleftrightarrow \mathrm{HS} + \mathrm{H}\,. \tag{CII}$$

HS reagiert wiederum mit H_2 und erzeugt H_2S:

$$\mathrm{HS} + \mathrm{H_2} \longleftrightarrow \mathrm{H_2S} + \mathrm{H}\,. \tag{CIII}$$

Man hat bei 1 AE $n_{\mathrm{H_2S}} \approx 2 \cdot 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Die HCS–Häufigkeit beträgt an diesem Punkt $n_{\mathrm{HS}} \approx 1.7 \cdot 10^9\,\mathrm{cm}^{-3}$, ist also um einen Faktor 10 kleiner. Das dritthäufigste Molekül ist HS. Bei ca. 0.9 AE erreicht es eine Häufigkeit von $\approx 10^9\,\mathrm{cm}^{-3}$. Die einzige mögliche Reaktion ist die Reaktion zwischen einem Methylenradikal und einem Schwefelatom:

$$\mathrm{S} + \mathrm{CH_2} \longrightarrow \mathrm{HCS} + \mathrm{H}\,. \tag{CIV}$$

Das Molekül OCS hat eine Häufigkeit von $\approx 2 \cdot 10^7\,\mathrm{cm}^{-3}$ bei 1 AE. Die wahrscheinlichste Möglichkeit seiner Bildung ist eine Oxidationsreaktion der CS–Moleküle durch OH. CS entsteht durch Reaktion zwischen einem Methylidinradikal und einem Schwefelatom:

$$\mathrm{S} + \mathrm{CH} \longrightarrow \mathrm{CS} + \mathrm{H}\,. \tag{CV}$$

Der Großteil der so gebildeten CS–Moleküle wird oxidiert:

$$\mathrm{CS} + \mathrm{OH} \longrightarrow \mathrm{OCS} + \mathrm{H}\,. \tag{CVI}$$

CS erreicht eine Häufigkeit von $\approx 8 \cdot 10^5\,\mathrm{cm}^{-3}$ bei 1 AE. OCS kann ebenfalls erzeugt werden, wenn HS (häufig in diesem Gebiet) mit CO reagiert:

$$\mathrm{HS} + \mathrm{CO} \longleftrightarrow \mathrm{OCS} + \mathrm{H}\,. \tag{CVII}$$

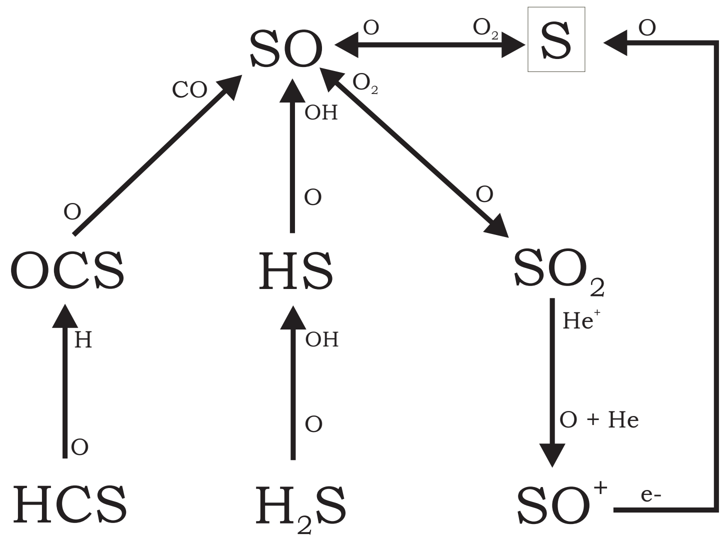

Abbildung 34: *Hauptreaktionen des* S–*Systems bei ca. 0.08 AE.*

Diese letzte Reaktion ist aber aufgrund einer Aktivierungsenergieschwelle von ca. 8000 K nicht so schnell wie (CVI).

Alle neutralen Spezies dieses Systems dissoziieren ab 1 AE und fast der ganze Schwefel wird zum SO_2. H_2S und HS dissoziieren nach den Rückwärtsreaktionen von (CII) und (CIII). HCS kann durch Reaktion mit N

$$HCS + N \longrightarrow HCN + S \tag{CVIII}$$

Cyanid produzieren. Sauerstoff ist auch ein Reaktionspartner:

$$HCS + O \longrightarrow OCS + H\,. \tag{CIX}$$

Diese zweite Reaktion ist von größerer Bedeutung, da nicht viel N in die Gasphase injiziert wird. Cyanid verschwindet zwar rasch aber es bildet sich sofort NH, das schnell zum molekularen Stickstoff reagiert (siehe Kap. 7.4.3). Die Zersetzung der Olivinteilchen beginnt ab s <1 AE und es ist zu erwarten, daß dann die zweite Reaktion aufgrund der dabei freigesetzten Sauerstoffatome die wichtigste ist. Das gebildete OCS wird durch Rückreaktion von (CVII) abgebaut. CO ist, wie erwartet, das Endprodukt.

CS kann auch mit O reagieren und liefert CO:

$$CS + O \longrightarrow CO + S\,. \tag{CX}$$

Wie gesagt werden fast alle freigesetzten S–Atome zum SO_2 transformiert, sobald die Olivinteilchen anfangen sich zu zersetzen. S ist mit sauerstoffhaltigen Spezies besonders reaktionsfreudig. Eine Reaktion mit dem häufigen OH führt zum SO:

$$S + OH \longrightarrow SO + H\,. \tag{CXI}$$

SO reagiert wiederum mit OH und liefert SO_2:

$$SO + OH \longrightarrow SO_2 + H\,. \tag{CXII}$$

In dem ganzen Bereich, in dem die Olivinzersetzung stattfindet, ist SO_2 die häufigste S–haltige Spezies. HS, S und H_2S werden ebenfalls gebildet. Die Häufigkeiten sind allerdings um einen Faktor 300 (für HS), 800 (für S) und 6000 (für H_2S) kleiner als die SO_2–Häufigkeit. Die Bildungsreaktionen dieser Moleküle sind (CII) und (CIII). Einige freie S–Atome sind auch zu beobachten und SO und OCS werden ebenfalls in relativ kleinen Mengen durch die schon erwähnten Reaktionen gebildet.

Wichtig ist hier auch die hohe Menge an Schwefelwasserstoff (H_2S) am aktuellen Ort der terrestrischen Planeten. Abb. 33 zeigt die Hauptreaktionen der neutralen Chemie des S–Systems bei 1 AE.

Im inneren Bereich der Scheibe verschwinden die schwefelhaltigen Moleküle (Abb. 23). SO_2 verschwindet bei ca. 0.08 AE durch Reaktion mit dem durch die Wasserdissoziation freigesetzten Sauerstoff:

$$SO_2 + O \longrightarrow SO + O_2\,. \tag{CXIII}$$

Ab diesem Punkt wird auch HS abgebaut. Die wahrscheinlichste Reaktion ist hier ebenfalls eine Reaktion mit dem Sauerstoff:

$$HS + O \longrightarrow SO + H\,. \tag{CXIV}$$

H_2S wird durch Reaktion mit O

$$H_2S + O \longrightarrow HS + OH\,, \tag{CXV}$$

aber auch mit OH

$$H_2S + OH \longrightarrow H_2O + HS \tag{CXVI}$$

abgebaut. SO erreicht ein Maximum bei etwa 0.08 AE und verschwindet dann. Wie H_2S reagiert SO vorzugsweise mit O

$$SO + O \longleftrightarrow S + O_2 \tag{CXVII}$$

und OH

$$SO + OH \longrightarrow SO_2 + H\,. \tag{CXVIII}$$

Die seltenen Moleküle OCS und HCS reagieren auch mit O:

$$OCS + O \longrightarrow CO + SO\,, \tag{CXIX}$$

$$HCS + O \longrightarrow OCS + H\,. \tag{CXX}$$

OCS kann außerdem mit H reagieren:

$$OCS + H \longrightarrow CO + HS\,. \tag{CXXI}$$

In der Nähe des Scheibenzentrums bleiben, wie erwartet, nur die freien Atome S und Fe übrig.

Ionenchemie:
Die berücksichtigten Ionen sind S^+, SH^+, CS^+, SO^+, HCS^+ und H_2S^+. Wie man in

Abb. 13 feststellen kann, ist zwischen 6 und etwa 0.13 AE kein einziges schwefelhaltiges Ion in merklichen Mengen zu beobachten. Nur zwischen 0.06 und 0.04 AE ($T_c \approx 4000\,\mathrm{K}$) wird SO^+ gebildet (Abb. 14). Die Häufigkeit erreicht $10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$. SO^+ bildet sich hauptsächlich durch Reaktion zwischen dem Ion He^+ und SO_2, das in diesem Gebiet relativ häufig ist:

$$\mathrm{He^+ + SO_2 \longrightarrow SO^+ + O + He}\,. \qquad \text{(CXXII)}$$

SO^+ verschwindet dann durch dissoziative Rekombination. Dabei werden freie S– und O–Atome in die Gasphase injiziert:

$$\mathrm{SO^+ + e^- \longrightarrow S + O}\,. \qquad \text{(CXXIII)}$$

Auch in diesem Fall scheint die Ionenchemie keinen merklichen Einfluß auf die neutrale Chemie zu haben. In Abb. 34 werden die Hauptreaktionen des S–Systems bei 0.08 AE dargestellt.

7.5 Wenn die Temperaturen hoch sind...

In dieser Modellrechnung haben wir Ionisationsreaktionen aufgrund von Elektronenstößen beiseite gelassen. Der Grund ist, daß diese Reaktionen in den meisten Fällen sehr stark endotherm und deshalb nur bei sehr hohen Temperaturen wirksam sind ($\approx 100\,000\,\mathrm{K}$ für einen typischen Wert der Elektronenbindungsenergie im Atom von 10 eV). Solche Temperaturen sind theoretisch im innersten Teil der Scheibe zu finden, der aber nicht Gegenstand unserer Modellrechnung ist. Bei solchen Temperaturen werden alle anwesenden Atome durch Stöße mit Elektronen, anderen Atomen oder Ionen ionisiert. Für eine beliebige Spezies X gilt

$$\mathrm{X + e^- \longrightarrow X^+ + e^- + e^-}\,, \qquad \text{(CXXIV)}$$

wenn die Ionisation durch Elektronen stattfindet. Unser Modell der Akkretionsscheibe ist aber für die Regionen, in denen solch hohe Temperaturen herrschen, nicht geeignet. Es ist zu erwarten, daß der Protostern dort stark mit der Scheibe wechselwirkt. In diesem Bereich muß dann die Struktur der Randschicht modelliert werden, was in dem hier verwendeten Modell nicht berücksichtigt wird.

7.6 Ist die kosmische Strahlung wirklich wichtig ?

Da wir nicht wissen, ob die einfallende kosmische Strahlung von einem Magnetfeld abgeschirmt wird oder nicht (siehe Kap. 6.1), müssen wir uns fragen, wie wichtig der Einfluß dieser Strahlung für die Ionisation der Materie ist. Diese Frage läßt sich beantworten, wenn die Rechnung ohne die entsprechenden Ionisationsprozesse wiederholt wird. Abb. 35, 36 und 37 zeigen den Verlauf der verschiedenen neutralen Spezies. Den Verlauf des Heliums und der Ionen zeigen Abb. 38, 39 und 40.

Abb. 38 zeigt, daß die maximale Elektronenhäufigkeit etwa $4{\cdot}10^8\,\mathrm{cm}^{-3}$ beträgt. Dies ist mit der Elektronenhäufigkeit in Abb. 12 zu vergleichen. Sie beträgt in diesem Fall etwa $8{\cdot}10^8\,\mathrm{cm}^{-3}$. Wenn die kosmische Strahlung nicht abgeschirmt wird, scheint ihr Einfluß genauso wichtig zu sein, wie der der radioaktiven Kerne. Es ist unwahrscheinlich, daß Magnetfelder in protoplanetaren Akkretionsscheiben gar nicht vorhanden sind. Die Frage ist, inwieweit sie für Ionisationsprozesse von Bedeutung sind. Der heutige Stand der Forschung läßt diese Frage bis jetzt ohne klare Antwort und wir müssen uns mit den beiden

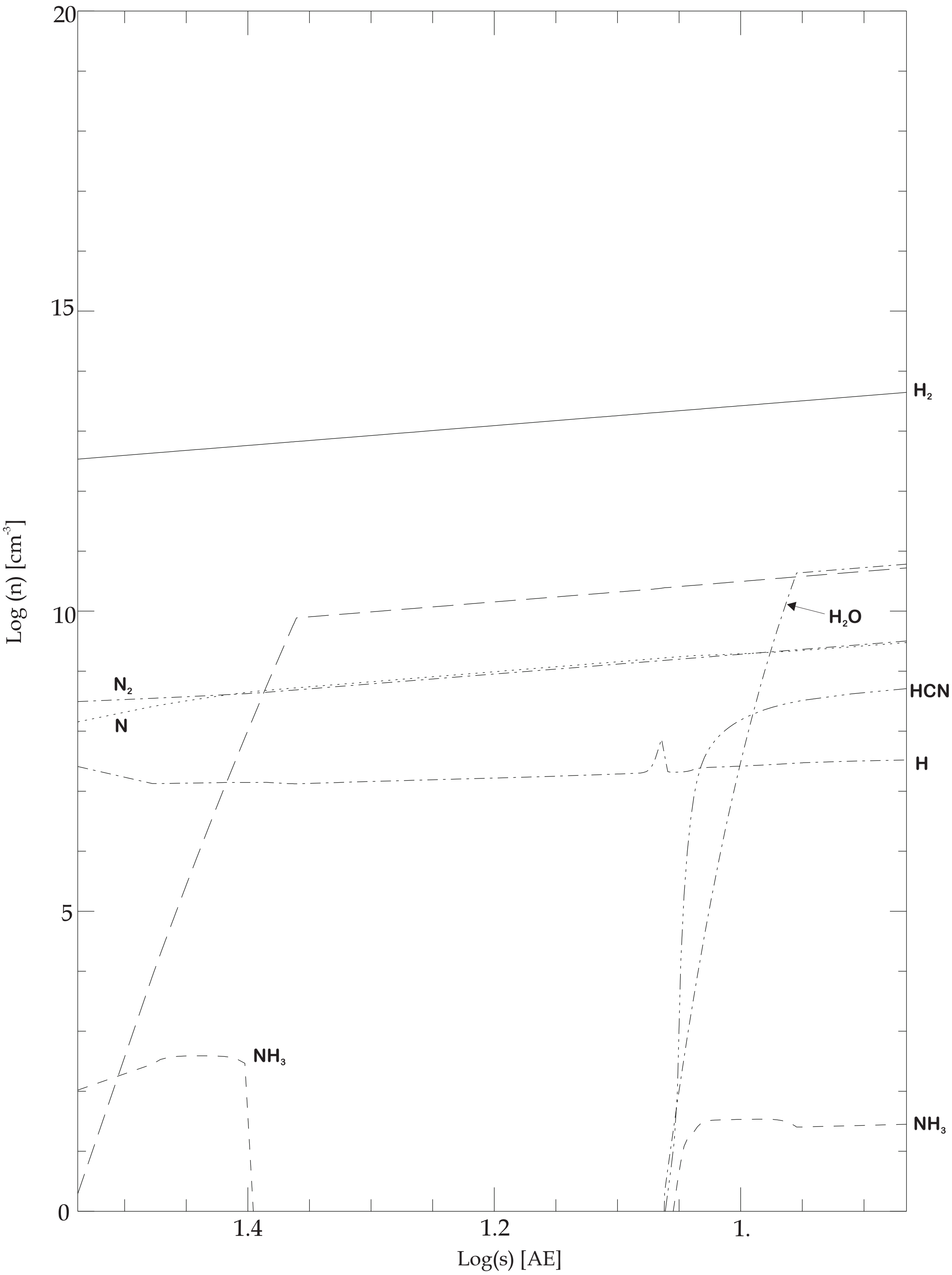

Abbildung 35: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 40 AE und ca. 7.3 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

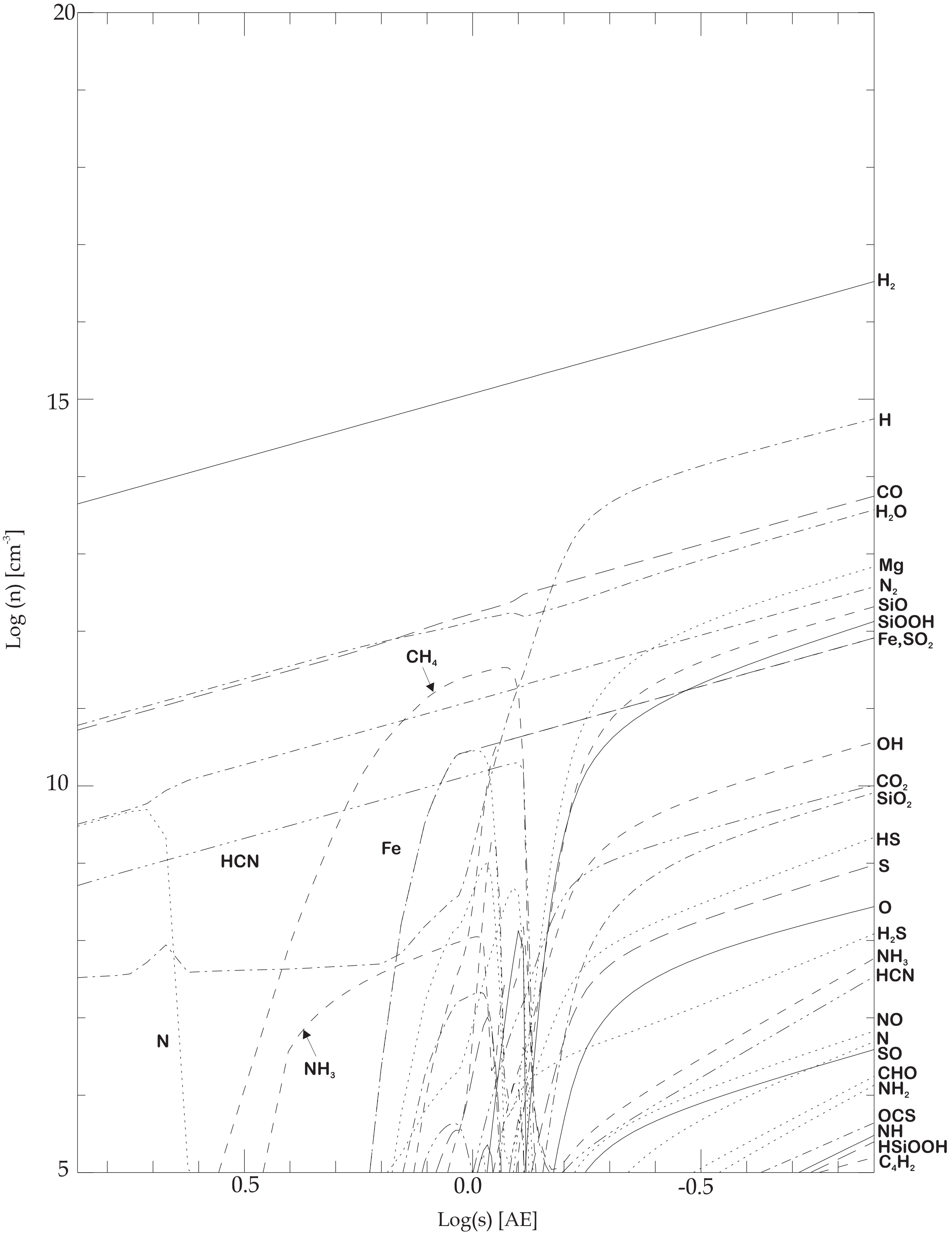

Abbildung 36: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 7.3 AE und ca. 0.13 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

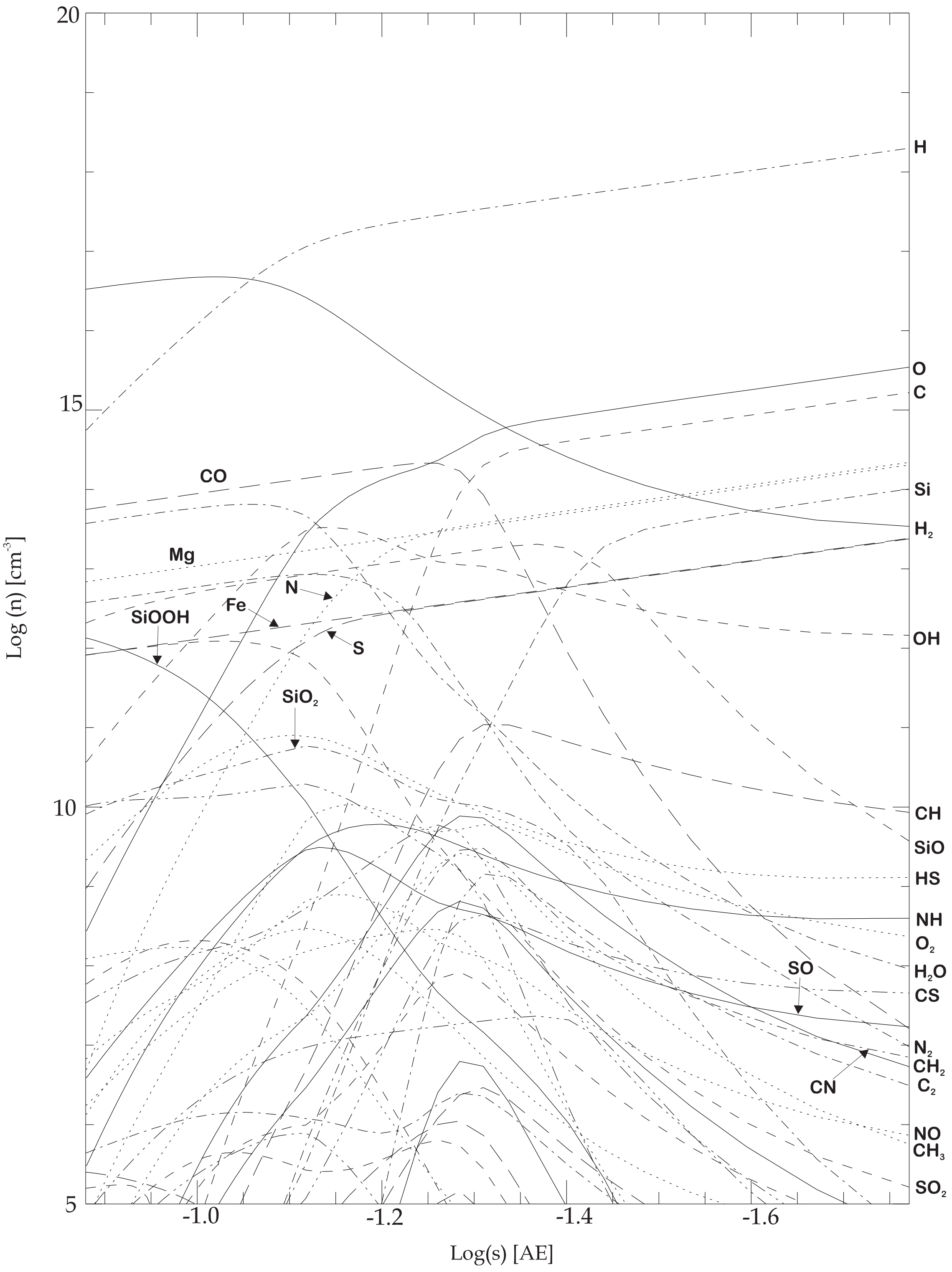

Abbildung 37: *Chemische Zusammensetzung (neutrale Spezies) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 0.13 AE und ca. 0.02 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

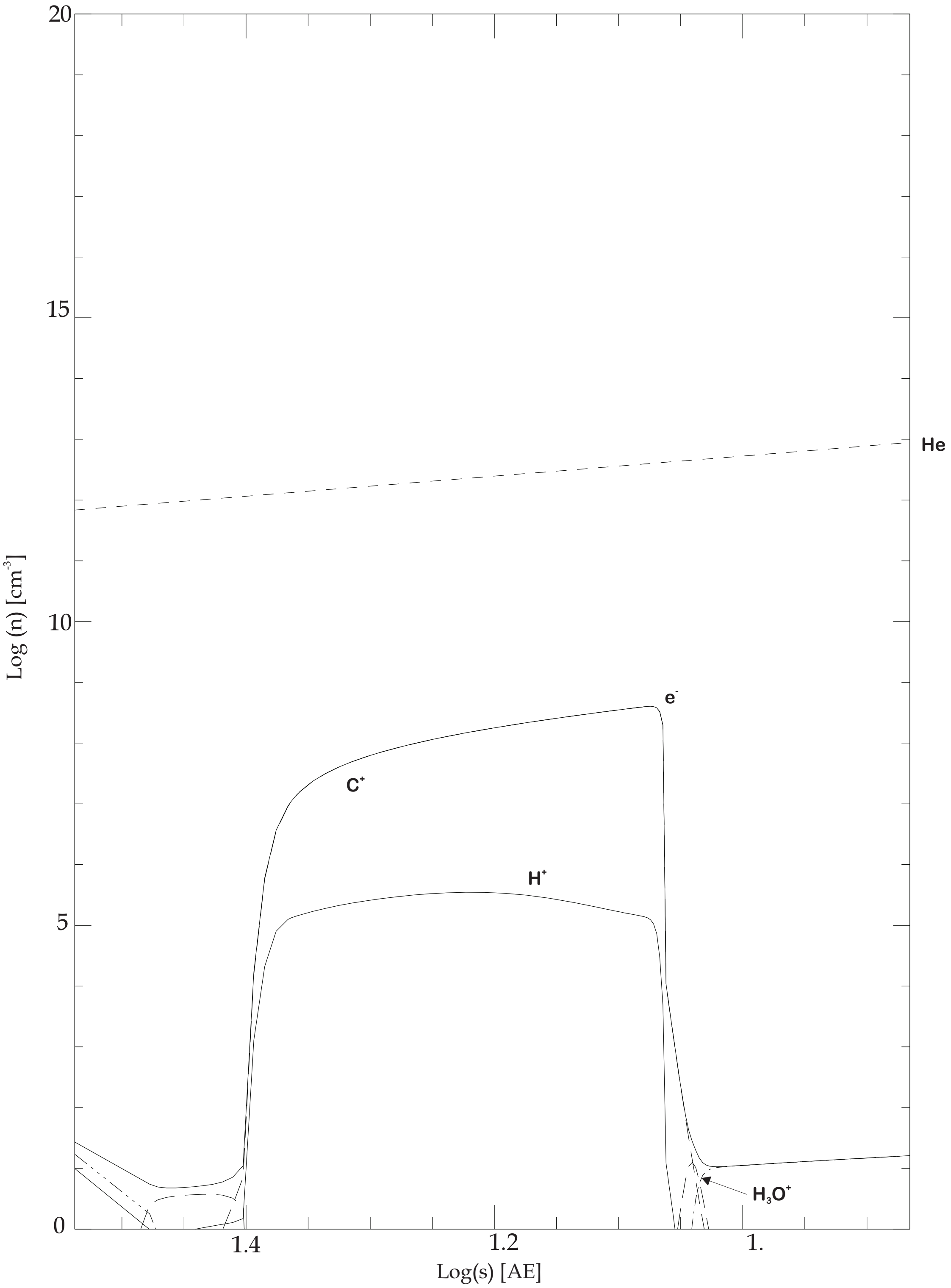

Abbildung 38: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 40 AE und ca. 7.3 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

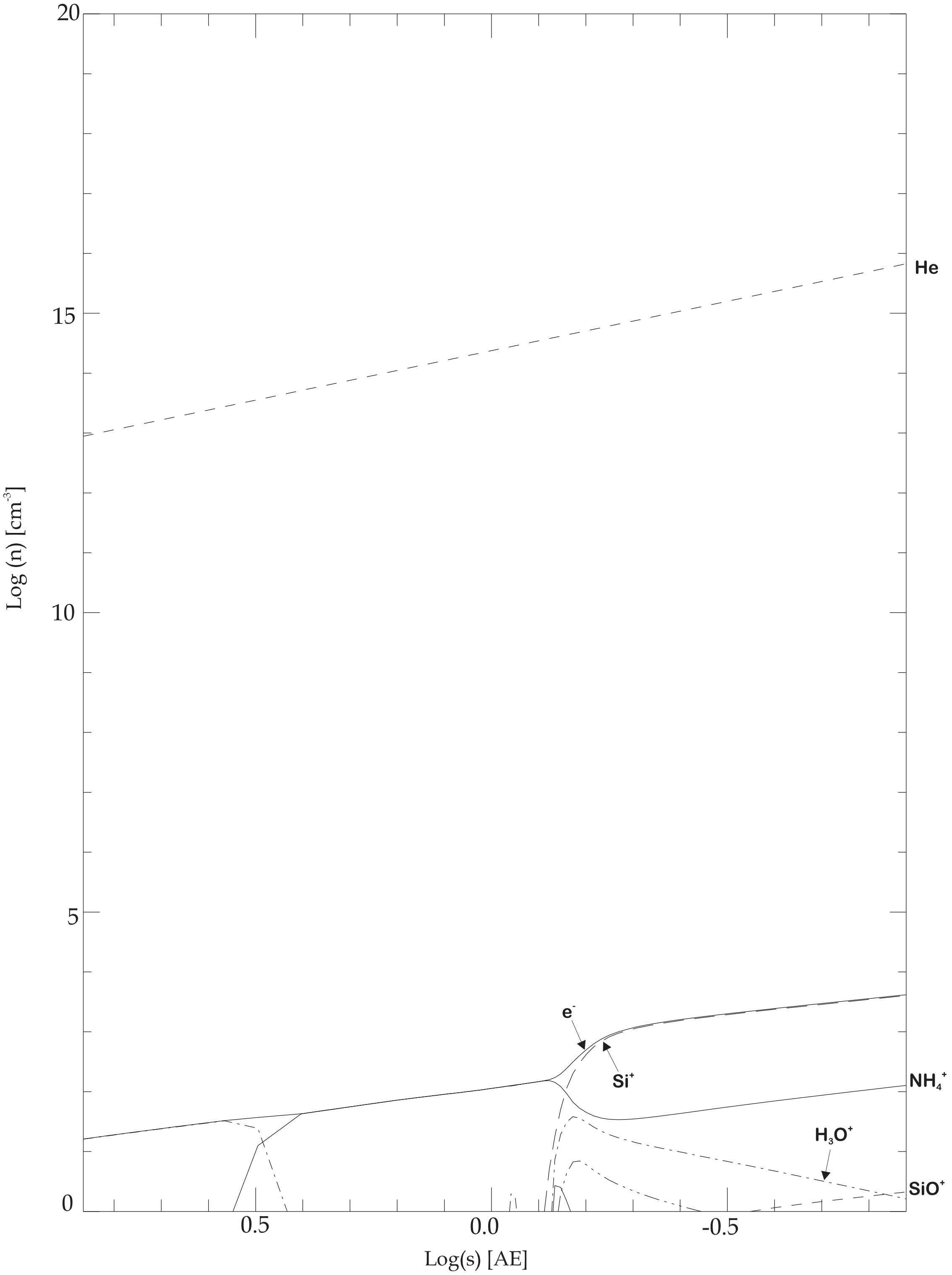

Abbildung 39: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 7.3 AE und ca. 0.13 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

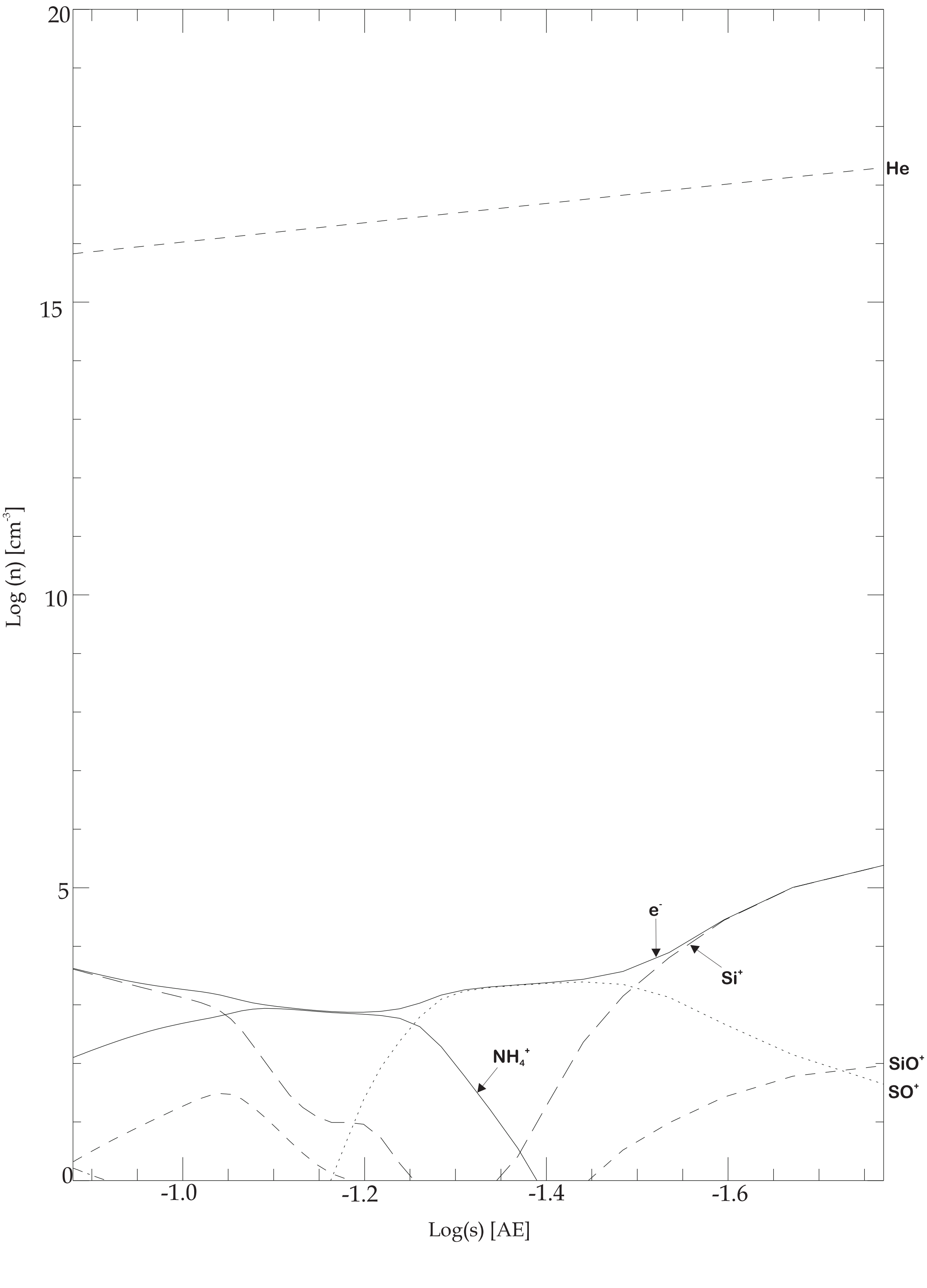

Abbildung 40: *Chemische Zusammensetzung (Ionen und* He*) der Gaskomponente in der Mittelebene der Akkretionsscheibe ohne Ionisation durch kosmische Strahlung zwischen 0.13 AE und ca. 0.02 AE. Beide Achsen sind logarithmisch dargestellt.*

Grenzfällen begnügen: wird die kosmische Strahlung vom Magnetfeld *komplett* oder *gar nicht* abgeschirmt ?

Die Testrechnung mit kompletter Abschirmung der kosmischen Strahlung zeigt, daß abgesehen von minimalen Unterschieden in den Ionenhäufigkeiten (Abb. 39 und 40) die ganze Chemie in dem restlichen Teil der Scheibe (s <7 AE) von der An– oder Abwesenheit der kosmischen Strahlung nicht wesentlich beeinflußt wird, da bereits der Untergrund an Ionisationsprozessen durch radioaktive Zerfälle etwa einen gleich großen Betrag zu den Ionen–Molekülreaktionen liefert.

8 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Gasphasenchemie unter Berücksichtigung von Staubzerstörungsprozessen in einer stationären, protoplanetaren α–Akkretionsscheibe untersucht. Die Wirkung der Staubopazität auf die Temperatur und die Rückwirkung der Temperatur auf die Opazität wurden ebenfalls berücksichtigt. Wir haben die Chemie der Spezies C, H, O, N, Si und S (die Chemie des Eisens und des Magnesiums haben wir außer Acht gelassen) und die Ionisationsprozesse durch die kosmische Strahlung und die radioaktiven Kerne (Al^{26}) betrachtet.

In unserem Modell besteht der Staub nur aus Olivin, Graphit und Troilit. Die Olivin– und die Graphitteilchen sind in eine CO– und H_2O–Eisschicht eingebettet.

Die Modellierung hat folgende wichtige Ergebnisse geliefert:

1) Zwischen dem Außenrand (40 AE) und 2 AE ist die Chemie aufgrund der tiefen Temperaturen wenig aktiv, was wir erwartet hatten. Ein überraschender Punkt ist die Anwesenheit hoher Cyanid–Mengen, das ein direktes Produkt der N_2–Dissoziation durch Ionisation ist (Die Ionisationsprozesse sind selbstverständlich temperaturunabhängig).

2) Zwischen 2 AE und 0.13 AE haben wir zahlreiche verschiedene Spezies (Atome und Moleküle) beobachtet. Von großer Bedeutung ist die Anwesenheit hoher Mengen organischer Verbindungen (besonders Methan), Ammoniak, Cyanid und Schwefelwasserstoff am aktuellen Ort der Erde.

3) Zwischen 0.13 AE und 0.02 AE verschwinden, wie erwartet, alle Moleküle und es bleiben in der Nähe des Protosterns nur die Einzelatome C, H, O, N, Si, S, Fe und Mg übrig.

Die Ionen sind nirgends in erheblichen Mengen vorhanden. Nur bei 11 AE ist etwa 1% des anwesenden Kohlenstoffes als C^+ vorhanden. Die Ionisationsprozesse führen allerdings direkt zu den hohen HCN– und NH_3–Mengen. Diese beiden Moleküle waren in einer Modellrechnung ohne Ionisationsprozesse nirgends in hohen Mengen zu beobachten.

Die Vernachlässigung der kosmischen Strahlung in einer Testrechnung hat gezeigt, daß sie für die Ionisation etwa genauso wichtig ist, wie die radioaktiven Kerne selbst. Der qualitative Verlauf der ganzen Chemie bleibt aber unverändert, da keiner der beiden Ionisationsprozesse stark dominiert.

Diese Modellrechnung ist auch ein hervorragender Test für die neu entwickelte Routine DAESOL, die sich als sehr effizient und stabil erwiesen hat.

9 Schlußbemerkungen

Das eigentliche Ziel dieser Modellrechnung ist die Bestimmung der Anfangsbedingungen für die Planetenentstehung. Dafür muß zuerst die sog. *viskose Instabilität* untersucht werden. Hinsichtlich der Untersuchung dieser Instabilität muß das Modell ergänzt und verbessert werden.

Die viskose Instabilität bildet das zur Zeit Grundmodell, um den Helligkeitsanstieg bestimmter veränderlicher Sterne (der sog. *Zwergnovae*) zu erklären (siehe Frank *et al.* (1992) für eine genaue Beschreibung). Eine Zwergnova bildet eigentlich ein Doppelsternsystem, das in der Regel aus einem kühlen Hauptreihenstern (Sekundärkomponente) und einem etwas massenreicheren Weißen Zwerg (Primärkomponente) besteht. Die Sekundärkomponente füllt ihre Roche–Fläche aus und Materie fließt auf den Weißen Zwerg über. Aufgrund des vorhandenen Drehimpulses fließt die Materie nicht direkt auf den Weißen Zwerg sondern bildet eine Akkretionsscheibe. Ist die dabei gebildete Scheibe viskos instabil, können plötzliche mehr oder weniger zeitlich regelmäßige Helligkeitsanstiege stattfinden.

Solche viskose Instabilitäten könnten im Prinzip auch in einer protoplanetaren Scheibe stattfinden. Der entscheidende Parameter für das Auftreten dieser Instabilität ist die Opazität der Materie. In unserem Modell haben wir nur die Opazität der Staubteilchen berücksichtigt und die Gasabsorption, d.h. die molekulare Absorption, wurde als konstant betrachtet. Diese Absorption, besonders die H_2O–Absorption, könnte für die Instabilität von großer Bedeutung sein. Es ist zu erwarten, daß Wasser bei Temperaturen zwischen 1500 und 2500 K den Hauptbeitrag zur Absorption liefert [Alexander & Ferguson 1994]. Die bisher einfach als konstant angesetzte Molekularopazität soll durch Einbau entsprechender Tabellen ersetzt werden, die deren Temperatur– und Dichteabhängigkeit berücksichtigen.

Das verwendete chemische Netzwerk scheint jetzt vollständig und konsistent zu sein. Hier sind keine zusätzlichen Entwicklungsarbeiten mehr erforderlich. Von beträchtlicher Bedeutung wäre die Berücksichtigung von Koagulationsprozessen der Staubteilchen und chemischen Reaktionen an deren Oberfläche. Die Koagulationsprozesse zwischen den Staubteilchen können, wie Rechnungen es zeigen [Ossenkopf 1993], die als konstant angenommene MRN–Radiusverteilung drastisch ändern und dabei die Staubopazität stark beeinflußen. Chemische Reaktionen an der Oberfläche der Staubteilchen sollten ebenfalls künftig integriert werden. Es ist durchaus möglich, daß dabei komplizierte CH–Verbindungen in großen Mengen durch Katalyse entstehen. Eine spezielle Behandlung der Chemie in der Akkretionsstoßfront ist ebenfalls nötig (siehe Kap. 6.9), um realistischere Anfangsbedingungen für die chemische Zusammensetzung der Materie zu erhalten.

Schließlich müssen wir auch turbulente Durchmischung in der Scheibe betrachten. In unserer Modellrechnung bewegt sich die Materie rein radial mit gegebener Geschwindigkeit. Das ist aber nicht ganz realistisch. Es ist zu erwarten, daß eine ständige Durchmischung der Materie in radialer Richtung stattfindet. Die Materie wird dabei in alle Richtungen transportiert und die Staubteilchen würden kondensieren bzw. verdampfen, nachdem die Materie durch turbulente Durchmischung in kältere bzw. wärmere Gebiete eintritt, und die ganze Chemie würde modifiziert werden. Mathematisch muß zu der Kontinuitätsgleichung (114) ein Diffusionsterm addiert werden. Diese Durchmischung der Materie findet nicht nur radial, sondern auch in vertikaler Richtung (z–Richtung) statt. Eine genaue

Bestimmung der vertikalen Struktur der Scheibe ist dabei nötig (2–dimensionale Akkretionsscheibe).

Sollte eine viskose Instabilität in der protoplanetaren Scheibe auftreten, müssen wir uns fragen, wie die ganze Chemie dadurch beeinflußt wird. Wenn die Scheibe zwischen einer „kühlen“ und einer „heißen“ Phase schwankt, sollte die Chemie drastisch verändert werden. Wenn die Scheibe in die „heiße“ Phase eintritt, sollten die Staubteilchen verschwinden und die Moleküle abgebaut werden. Bei ausreichend hohen Temperaturen sollte die ganze Materie ionisiert werden. Wie sieht dann die Chemie aus, wenn die Scheibe in die kühlere Phase zurückkehrt ? Wie sieht die Chemie aus, wenn die Instabilität zeitlich periodisch ist ? Falls die Bedingung für Instabilität erfüllt ist, was wir erwarten, dann soll mit Rechnungen zur Modellierung des Verlaufs eines Ausbruchs begonnen werden.

Alles in allem ist die in dieser Arbeit vorgestellte Modellrechnung trotz ihrer Komplexität im Vergleich zur Realität immer noch recht einfach. Die vorgeschlagenen Verbesserungen sind für eine konsistente Modellierung einer protoplanetaren Scheibe und selbstverständlich für die Modellierung der Entstehung von Planeten unabdingbar.

Anhang A: verwendete chemische Reaktionen

Wir benutzen die Definition (109) (siehe Kap. 6.2) für die Ratenkoeffizienten. Aufgelistet sind die verwendeten chemischen Reaktionen und die Parameter k_0, α und C.

CHON–Chemie

Quelle: [Mitchell 1984] und [Baulch *et al.* 1992].

Chemische Reaktionen:						k_0	α	C
1	H		+C2	-->CH	+C	.3D-10	.5	30450.
2	H		+NO	-->NH	+O	.8D-11	.5	38200.
3	H		+NO	-->OH	+N	.4D-11	.5	24460.
4	H		+CO2	-->OH	+CO	.2D-09	.0	13300.
5	H		+HNO	-->OH	+NH	.3D-12	.5	11600.
6	H		+HO2	-->H2O	+O	.5D-10	.0	866.
7	H		+HO2	-->H2	+O2	.7D-10	.0	710.
8	H		+HO2	-->OH	+OH	.3D-09	.0	440.
9	H		+N2O	-->NH	+NO	.2D-12	.5	15100.
10	H		+N2O	-->OH	+N2	.1D-09	.0	7600.
11	H		+NO2	-->OH	+NO	.6D-09	.0	740.
12	H		+H2O2	-->H2	+HO2	.3D-11	.0	1890.
13	H	+H	+H	-->H	+H2	.3D-30	-.6	0.
14	H		+H2O2	-->OH	+H2O	.2D-10	.0	1800.
15	H		+H3CO	-->H2	+HCHO	.3D-10	.0	0.
16	H		+HNCO	-->H2	+OCN	.3D-09	-.3	10190.
17	H		+OCN	-->NH	+CO	.9D-10	.0	0.
18	H		+OCN	-->HCN	+O	.9D-10	.0	0.
19	H		+C2H2	-->H2	+C2H	.1D-09	.0	14000.
20	H		+C2H3	-->H2	+C2H2	.2D-10	.0	0.
21	H		+C2H4	-->H2	+C2H3	.9D-09	.0	7500.
22	H		+C2H6	-->H2	+C2H5	.2D-14	1.5	3730.
23	H		+CHCO	-->CH2	+CO	.2D-09	.0	0.
24	H		+CHCO	-->H2	+C2O	.2D-09	.0	0.
25	H		+CH2CO	-->CH3	+CO	.3D-10	.0	1700.
26	H		+CH3CHO	-->H2	+CH3CO	.7D-14	1.2	1210.
27	H		+CH3CHO	-->H2	+CH2CHO	.7D-14	1.2	1210.
28	H		+C6H5OH	-->H2	+C6H5O	.2D-09	.0	6240.
29	H		+C6H5OH	-->C6H6	+OH	.3D-10	.0	3990.
30	H		+C6H5CH3	-->H2	+C6H5CH2	.7D-21	3.4	1570.
31	H		+C6H5C2H5	-->H2	+C6H5C2H4	.2D-11	.0	0.
32	H		+CHO	-->H2	+CO	.1D-09	.0	0.
33	H		+HCHO	-->H2	+HCO	.4D-13	1.0	1650.
34	H		+CH2OH	-->OH	+CH3	.4D-06	-1.0	-1570.
35	H		+H3CO	-->OH	+CH3	.2D-05	-.8	-5470.
36	H		+CH2CO	-->OH	+C2H2	.2D-06	.6	18740.
37	H2		+O2	-->HO2	+H	.9D-10	.0	29100.
38	H2		+CO2	-->H2O	+CO	.2D-14	.5	7550.
39	H2		+HO2	-->H2O2	+H	.1D-11	.0	9400.

40	H2		+H	-->H	+H	+H		.1D-03	-1.0	55000.
41	H2		+H2	-->H	+H	+H2		.2D-08	.0	48350.
42	H2	+H	+H	-->H2	+H2			.3D-30	-.6	0.
43	H2		+HCHO	-->H	+H3CO			.1D-10	.6	41800.
44	H2		+OCN	-->H	+HNCO			.1D-10	.0	4550.
45	H2		+C2H2	-->H	+C2H3			.3D-09	-.2	33200.
46	H2		+C2H3	-->H	+C2H4			.2D-06	.7	5230.
47	H2		+C2H5	-->H	+C2H6			.8D-19	2.3	5390.
48	H2		+C2O	-->H	+CHCO			.5D-10	.3	12990.
49	H2		+CH3CO	-->H	+CH3CHO			.6D-17	1.8	9900.
50	H2		+CH2CHO	-->H	+CH3CHO			.1D-15	1.6	4177.
51	H2		+C6H5O	-->H	+C6H5OH			.2D-11	.5	14933.
52	H2		+C6H5CH2	-->H	+C6H5CH3			.3D-21	3.3	9630.
53	H2		+C6H5C2H4	-->H	+C6H5C2H5			.1D-12	.2	11180.
54	H2		+CO	-->H	+CHO			.1D-10	.5	44500.
55	H2		+HCO	-->H	+HCHO			.1D-15	1.5	8380.
56	O2		+H	-->OH	+O			.3D-09	.0	8460.
57	O2		+N	-->NO	+O			.4D-11	.0	3150.
58	O2		+CH	-->HCO	+O			.8D-12	.5	3000.
59	O2		+CN	-->CO	+NO			.5D-12	.0	0.
60	O2		+CO	-->CO2	+O			.4D-11	.0	24000.
61	O2		+H2	-->OH	+OH			.4D-11	.0	9300.
62	O2		+N2	-->N2O	+O			.1D-09	.0	55200.
63	O2		+NO	-->NO2	+O			.3D-11	.0	23400.
64	O2		+CH3	-->HO2	+CH2			.5D-11	.0	34975.
65	O2		+CH3	-->H2CO	+OH			.1D-11	.0	4560.
66	O2		+CH4	-->CH3	+HO2			.7D-10	.0	28630.
67	O2		+HCO	-->HO2	+CO			.3D-11	.0	3500.
68	O2		+H	-->O	+O	+H		.6D-08	.0	52300.
69	O2		+H2	-->O	+O	+H2		.6D-08	.0	52300.
70	O2		+C2H6	-->HO2	+C2H5			.1D-09	.0	26100.
71	O2		+HCHO	-->HO2	+HCO			.1D-09	.0	20460.
72	O2		+CH3CHO	-->HO2	+CH3CO			.5D-10	.0	19700.
73	OH		+C	-->CH	+O			.1D-11	.5	14800.
74	OH		+H	-->O	+H2			.1D-13	1.0	3500.
75	OH		+N	-->NH	+O			.2D-11	.5	17765.
76	OH		+O	-->O2	+H			.2D-10	.0	353.
77	OH		+CN	-->HCN	+O			.1D-09	.0	0.
78	OH		+H2	-->H2O	+H			.2D-15	1.6	1660.
79	OH		+NH	-->H2O	+N			.8D-10	.0	0.
80	OH		+OH	-->H2O	+O			.2D-14	1.1	50.
81	OH		+CH2	-->CH3	+O			.8D-12	.5	3000.
82	OH		+CH2	-->H2O	+CH			.8D-12	.5	3000.
83	OH		+CH3	-->H2O	+CH2			.6D-10	.0	0.
84	OH		+HCN	-->H2O	+CN			.1D-10	.0	5400.
85	OH		+HCO	-->H2O	+CO			.5D-13	1.0	0.
86	OH		+HNO	-->H2O	+NO			.6D-10	.5	5000.
87	OH		+HO2	-->H2O	+O2			.5D-10	.0	-250.
88	OH		+N2O	-->HO2	+N2			.5D-10	.0	7550.
89	OH		+C2H2	-->H2O	+C2H			.1D-10	.0	2335.

90	OH	+H2CO	-->H2O	+HCO		.5D-13	1.0	0.
91	OH	+H2O2	-->H2O	+HO2		.3D-11	.0	145.
92	OH	+H	-->O	+H	+H	.6D-08	.0	50900.
93	OH	+H2	-->O	+H	+H2	.6D-08	.0	50900.
94	OH	+NH	-->NO	+H2		.8D-10	.0	0.
95	OH	+CH3	-->H	+CH2OH		.6D-10	.0	0.
96	OH	+CH3	-->H	+H3CO		.6D-10	.0	0.
97	OH	+CN	-->OCN	+H		.1D-09	.0	0.
98	OH	+C2H2	-->H	+CH2CO		.1D-09	.0	6500.
99	OH	+C2H6	-->H2O	+C2H5		.1D-16	2.0	435.
100	OH	+CH2CO	-->CH2OH	+CO		.2D-10	.0	0.
101	OH	+CH2CO	-->H2CO	+HCO		.2D-10	.0	0.
102	OH	+CH3CHO	-->H2O	+CH3CO		.4D-13	.7	-560.
103	OH	+CH3CHO	-->H2O	+CH2CHO		.4D-13	.7	-560.
104	OH	+C6H6	-->H2O	+C6H5		.3D-15	1.4	730.
105	OH	+C6H6	-->H	+C6H5OH		.2D-10	.0	5330.
106	OH	+C6H5OH	-->H2O	+C6H5O		.1D-10	.0	0.
107	OH	+C6H5CH3	-->H2O	+C6H5CH2		.9D-14	.0	1440.
108	OH	+C6H5C2H5	-->H2O	+C6H5C2H4		.9D-11	.0	0.
109	OH	+HCHO	-->H2O	+CHO		.6D-14	1.2	-250.
110	OH	+H2CO	-->O	+H3CO		.2D-05	-.8	5470.
111	OH	+CH3O2	-->O	+CH3OOH		.2D-09	.2	10010.
112	OH	+C2H5	-->O	+C2H6		.3D-19	2.2	3664.
113	OH	+CH3CO	-->O	+CH3CHO		.4D-14	.6	8690.
114	OH	+CH2CHO	-->O	+CH3CHO		.1D-13	.5	2960.
115	OH	+H2O	-->H	+H2O2		.1D-15	1.3	35500.
116	OH	+H3CO	-->HO2	+CH3		.3D-09	-1.0	12300.
117	OH	+CO2	-->CHO	+O2		.2D-22	.7	47960.
118	OH	+CO	-->O	+CHO		.2D-11	.5	43600.
119	OH	+CHO	-->O	+HCHO		.1D-14	.9	7200.
120	OH	+C6H5	-->O	+C6H6		.1D-26	4.6	-4131.
121	H2O	+H	-->OH	+H2		.1D-09	.0	10250.
122	H2O	+O	-->OH	+OH		.1D-10	.0	9240.
123	H2O	+NH	-->HNO	+H2		.2D-12	.5	1500.
124	H2O	+CH3	-->CH4	+OH		.1D-10	.0	12900.
125	H2O	+H	-->OH	+H	+H	.6D-08	.0	52900.
126	H2O	+H2	-->OH	+H	+H2	.6D-08	.0	52900.
127	H2O	+C2H5	-->OH	+C2H6		.4D-20	2.7	9775.
128	H2O	+CH3CO	-->OH	+CH3CHO		.3D-15	1.3	15840.
129	H2O	+CH2CHO	-->OH	+CH3CHO		.7D-15	.3	10090.
130	H2O	+C6H5	-->OH	+C6H6		.3D-19	2.3	4610.
131	H2O	+C6H5O	-->OH	+C6H5OH		.6D-12	.5	16364.
132	H2O	+C6H5CH2	-->OH	+C6H5CH3		.3D-13	-.2	15730.
133	H2O	+C6H5C2H4	-->OH	+C6H5C2H5		.3D-11	.1	18850.
134	H2O	+CHO	-->OH	+HCHO		.1D-15	1.5	14175.
135	HO2	+N	-->O2	+NH		.2D-12	.0	0.
136	HO2	+CH	-->O2	+CH2		.2D-13	.5	7550.
137	HO2	+CH	-->HCO	+OH		.8D-12	.5	3000.
138	HO2	+CO	-->OH	+CO2		.2D-09	.5	11900.
139	HO2	+CH3	-->O2	+CH4		.2D-12	.5	3000.

140	HO2	+H2O	-->H2O2	+OH		.5D-10	.0	16500.
141	HO2	+HCO	-->H2CO	+O2		.2D-09	.0	1500.
142	HO2	+HO2	-->H2O2	+O2		.3D-11	.0	775.
143	HO2	+H2CO	-->H2O2	+HCO		.2D-11	.0	4000.
144	HO2	+NH2	-->NH3	+O2		.3D-10	.0	0.
145	HO2	+NH2	-->HNO	+H2O		.3D-10	.0	0.
146	HO2	+CH3	-->OH	+H3CO		.3D-10	.0	0.
147	HO2	+CH4	-->H2O2	+CH3		.1D-10	.0	12400.
148	HO2	+HCHO	-->H2O2	+CHO		.5D-11	.0	6580.
149	HO2	+C2H6	-->H2O2	+C2H5		.2D-10	.0	10300.
150	HO2	+CH3CHO	-->H2O2	+CH3CO		.5D-11	.0	6000.
151	HO2	+C2H5	-->O2	+C2H6		.2D-13	.4	470.
152	HO2	+HCO	-->O2	+HCHO		.1D-08	.1	-140.
153	HO2	+CH3CO	-->O2	+CH3CHO		.2D-10	.3	1100.
154	H2O2	+H2	-->OH	+OH	+H2	.2D-06	.0	22900.
155	H2O2	+CH3	-->HO2	+CH4		.5D-10	-.5	3450.
156	H2O2	+CHO	-->HO2	+HCHO		.7D-11	-.3	16420.
157	H2O2	+C2H5	-->HO2	+C2H6		.4D-12	.1	3650.
158	H2O2	+CH3CO	-->HO2	+CH3CHO		.2D-11	-.1	6385.
159	NH	+C	-->CH	+N		.1D-11	.5	4000.
160	NH	+H	-->N	+H2		.2D-10	.5	0.
161	NH	+N	-->N2	+H		.5D-10	.0	500.
162	NH	+CN	-->HCN	+N		.2D-12	.5	1000.
163	NH	+H2	-->NH2	+H		.6D-13	.8	6700.
164	NH	+NH	-->N2	+H2		.2D-10	.0	0.
165	NH	+O2	-->NO	+OH		.1D-12	.0	770.
166	NH	+O2	-->NO2	+H		.1D-12	.0	770.
167	NH	+O2	-->HNO	+O		.1D-12	.0	770.
168	NH	+NO	-->N2O	+H		.5D-10	.0	0.
169	NH	+NO	-->N2H	+O		.5D-10	.0	0.
170	NH	+NO	-->N2	+OH		.5D-10	.0	0.
171	NH	+CO	-->H	+OCN		.2D-15	1.3	15300.
172	NH2	+H	-->NH	+H2		.1D-10	.0	0.
173	NH2	+O	-->HNO	+H		.3D-11	.0	0.
174	NH2	+H2	-->NH3	+H		.2D-10	.2	6300.
175	NH2	+OH	-->NH	+H2O		.1D-12	.0	0.
176	NH2	+OH	-->NH3	+O		.3D-13	.4	250.
177	NH2	+NO	-->N2	+H2O		.2D-11	.0	-650.
178	NH2	+NO	-->N2H	+OH		.2D-11	.0	-650.
179	NH2	+NO	-->N2O	+H2		.2D-11	.0	-650.
180	NH3	+H	-->NH2	+H2		.2D-10	.2	5700.
181	NH3	+O	-->OH	+NH2		.2D-10	.0	3670.
182	NH3	+OH	-->NH2	+H2O		.2D-11	.0	800.
183	NH3	+CH3	-->NH2	+CH4		.2D-12	.0	5100.
184	NH3	+H2	-->NH2	+H	+H2	.1D-07	.0	42400.
185	NH3	+O2	-->HO2	+NH2		.2D-08	-.1	29800.
186	CN	+N	-->N2	+C		.3D-09	.0	0.
187	CN	+H2	-->HCN	+H		.1D-09	.0	2670.
188	CN	+O2	-->OCN	+O		.1D-10	.0	205.
189	CN	+H2O	-->HCN	+OH		.1D-10	.0	3750.

190	CN	+H2O	-->HNCO	+H		.1D-10	.0	3750.
191	HCN	+O	-->OH	+CN		.2D-17	2.1	3075.
192	CH	+H	-->C	+H2		.1D-11	.5	2200.
193	CH	+H2	-->CH2	+H		.2D-09	.0	1760.
194	CH	+OH	-->HCO	+H		.8D-12	.5	5000.
195	CH	+CH4	-->CH3	+CH2		.4D-12	.7	3000.
196	CH	+HCO	-->CH2	+CO		.5D-13	.7	500.
197	CH	+H2CO	-->CH2	+HCO		.2D-12	.7	2000.
198	CH	+H	-->C	+H	+H	.6D-08	.0	40200.
199	CH	+H2	-->C	+H	+H2	.6D-08	.0	40200.
200	CH	+O2	-->CO	+OH		.6D-10	.0	0.
201	CH	+H2	-->CH3			.2D-09	.0	1760.
202	CH	+O2	-->CHO	+O		.6D-10	.0	0.
203	CH2	+H	-->CH	+H2		.1D-10	.0	-900.
204	CH2	+N	-->HCN	+H		.5D-10	.0	250.
205	CH2	+O	-->CH	+OH		.3D-12	.7	13100.
206	CH2	+O	-->CO	+H	+H	.2D-09	.0	0.
207	CH2	+O	-->HCO	+H		.8D-12	.5	2000.
208	CH2	+CN	-->HCN	+CH		.5D-11	.0	2500.
209	CH2	+H2	-->CH3	+H		.2D-10	.2	6400.
210	CH2	+O2	-->HCO	+OH		.2D-09	.0	1800.
211	CH2	+O2	-->H2CO	+O		.8D-12	.5	3500.
212	CH2	+OH	-->H2CO	+H		.2D-10	.0	2517.
213	CH2	+CH2	-->CH3	+CH		.8D-12	.5	3000.
214	CH2	+CH4	-->CH3	+CH3		.2D-11	.7	10000.
215	CH2	+HCO	-->CH3	+CO		.5D-13	.7	500.
216	CH2	+H2CO	-->CH3	+HCO		.3D-12	.0	3270.
217	CH2	+CO2	-->H2CO	+CO		.4D-13	.0	0.
218	CH2	+O2	-->CO	+H2O		.4D-10	.0	750.
219	CH2	+O2	-->CO2	+H2		.4D-10	.0	750.
220	CH2	+O2	-->HCHO	+O		.4D-10	.0	750.
221	CH2	+CH2	-->C2H2	+H2		.2D-09	.0	400.
222	CH2	+CH3	-->C2H4	+H		.7D-10	.0	0.
223	CH2	+CO	-->H	+CHCO		.4D-15	1.5	13865.
224	CH3	+H	-->CH2	+H2		.1D-09	.0	7600.
225	CH3	+N	-->HCN	+H	+H	.5D-10	.0	250.
226	CH3	+O	-->H2CO	+H		.1D-09	.0	0.
227	CH3	+CN	-->CH2	+HCN		.2D-12	.7	1500.
228	CH3	+H2	-->CH4	+H		.1D-19	2.7	4740.
229	CH3	+CH3	-->C2H4	+H2		.1D-06	.0	21600.
230	CH3	+CH3	-->C2H5	+H		.5D-10	.0	6800.
231	CH3	+HCO	-->CH4	+CO		.5D-12	.5	0.
232	CH3	+H2CO	-->CH4	+HCO		.7D-11	.0	4450.
233	CH3	+O2	-->H3CO	+O		.2D-09	.0	15800.
234	CH3	+O2	-->HCHO	+OH		.5D-12	.0	4500.
235	CH3	+C2H5	-->CH4	+C2H4		.2D-11	.0	0.
236	CH3	+C2H6	-->CH4	+C2H5		.3D-30	6.0	3043.
237	CH3	+CH3CHO	-->CH4	+CH3CO		.3D-29	5.6	1240.
238	CH3		-->CH	+H2		.1D-10	.6	55760.
239	CH4	+H	-->CH3	+H2		.2D-19	3.0	4045.

240	CH4	+O	-->CH3	+OH		.1D-14	1.6	4270.
241	CH4	+CN	-->HCN	+CH3		.5D-12	.7	2500.
242	CH4	+OH	-->H2O	+CH3		.3D-16	1.8	1400.
243	CH4	+H2	-->CH3	+H	+H2	.3D-06	.0	44035.
244	CH4	+C2H4	-->CH3	+C2H5		.6D-09	-.1	34500.
245	CH4	+C2H5	-->CH3	+C2H6		.2D-32	6.6	5343.
246	CH4	+CH3CO	-->CH3	+CH3CHO		.5D-31	6.1	8090.
247	C2H2	+O	-->CH2	+CO		.4D-19	2.8	250.
248	C2H2	+C2H	-->C4H2	+H		.5D-10	.0	0.
249	C2H2	+C2H2	-->C4H3	+H		.2D-10	.0	22800.
250	C2H2	+H2	-->CH2	+CH2		.1D-02	-1.2	66640.
251	C2H3	+O2	-->HCHO	+CHO		.9D-11	.0	0.
252	C2H4	+O	-->CH3	+HCO		.6D-17	2.1	0.
253	C2H4	+O	-->H2CO	+CH2		.6D-17	2.1	0.
254	C2H4	+OH	-->C2H3	+H2O		.3D-10	.0	2990.
255	C2H4	+CH3	-->C2H3	+CH4		.7D-11	.0	5600.
256	C2H4	+H	-->CH2	+CH3		.3D-03	-1.1	32200.
257	C2H4	+HO2	-->C2H5	+O2		.1D-12	-.2	5450.
258	C2H5	+H	-->CH3	+CH3		.5D-10	.0	0.
259	C2H5		-->C2H4	+H		.3D-10	.0	19965.
260	C2H5	+O2	-->C2H4	+HO2		.2D-13	.0	-1100.
261	C2H5	+C2H5	-->C2H6	+C2H4		.2D-11	.0	0.
262	HCO	+C	-->CH	+CO		.1D-10	.0	0.
263	HCO	+H	-->CO	+H2		.3D-09	.0	0.
264	HCO	+O	-->CO2	+H		.5D-12	.0	0.
265	HCO	+O	-->OH	+CO		.5D-10	.0	0.
266	HCO	+CN	-->HCN	+CO		.3D-12	.5	0.
267	HCO	+HCO	-->H2CO	+CO		.3D-12	.5	0.
268	HCO	+H2	-->CO	+H	+H2	.1D-08	.0	8350.
269	HCO	+HCO	-->O	+CH2CO		.6D-17	1.1	13580.
270	HCO	+C6H6	-->O	+C6H5CH2		.2D-13	1.3	38474.
271	H2CO	+H	-->HCO	+H2		.2D-13	.0	1890.
272	H2CO	+O	-->HCO	+OH		.2D-12	1.0	1750.
273	H2CO	+CN	-->HCO	+HCN		.2D-12	.7	1500.
274	H2CO	+HCO	-->OH	+CH2CO		.2D-13	.8	7070.
275	NO	+C	-->CO	+N		.1D-11	.5	4000.
276	NO	+N	-->N2	+O		.3D-10	.0	410.
277	NO	+O	-->O2	+N		.2D-14	1.0	1950.
278	NO	+CH	-->HCO	+N		.3D-10	.0	5000.
279	NO	+CH	-->HCN	+O		.3D-11	.0	0.
280	NO	+CN	-->CO	+N2		.5D-12	.0	0.
281	NO	+NO	-->N2	+O2		.2D-09	.0	38060.
282	NO	+OH	-->NO2	+H		.5D-11	.0	15100.
283	NO	+CH2	-->H2CO	+N		.3D-11	.0	3500.
284	NO	+HCO	-->HNO	+CO		.3D-12	.5	1000.
285	NO	+HNO	-->N2O	+OH		.3D-11	.0	13000.
286	NO	+N2O	-->NO2	+N2		.3D-09	.0	25000.
287	NO	+H2	-->N	+O	+H2	.7D-03	-1.5	75500.
288	NO	+CO	-->O	+OCN		.7D-08	1.1	51200.
289	NO	+H2	-->OH	+NH		.5D-08	.2	36800.

290	NO	+OH	-->NH	+O2		.2D-13	.2	27970.
291	NO2	+CO	-->NO	+CO2		.3D-11	.0	15000.
292	NO2	+NH	-->NO	+HNO		.3D-12	.5	2500.
293	NO2	+H2	-->NO	+O	+H2	.2D-07	.0	33000.
294	NO2	+H	-->NH	+O2		.6D-09	-.7	13670.
295	N2O	+CO	-->N2	+CO2		.2D-12	.0	10000.
296	N2O	+H2	-->N2	+O	+H2	.8D-09	.0	29000.
297	N2O	+H2	-->NH2	+NO		.7D-06	-.9	23550.
298	N2O	+CO	-->OCN	+NO		.1D-09	.2	33200.
299	HNO	+H	-->NO	+H2		.1D-10	.0	1500.
300	HNO	+CH	-->NO	+CH2		.1D-11	.5	0.
301	HNO	+CN	-->NO	+HCN		.7D-12	.5	0.
302	HNO	+CO	-->CO2	+NH		.2D-12	.5	0.
303	HNO	+CH2	-->NO	+CH3		.1D-11	.5	0.
304	HNO	+CH3	-->NO	+CH4		.8D-12	.5	0.
305	HNO	+HCO	-->H2CO	+NO		.5D-12	.5	0.
306	HNO	+H2O	-->HO2	+NH2		.6D-10	.1	41200.
307	OCN	+O2	-->CO	+NO2		.8D-09	.0	773.
308	OCN	+NO	-->N2O	+CO		.2D-10	.0	-200.
309	OCN	+NO	-->N2	+CO2		.2D-10	.0	-200.
310	OCN	+H	-->OH	+CN		.1D-03	-1.3	12100.
311	O	+CH	-->OH	+C		.7D-10	.0	0.
312	O	+CN	-->NO	+C		.2D-11	.5	14545.
313	O	+H2	-->OH	+H		.9D-19	2.7	3160.
314	O	+NH	-->NO	+H		.1D-11	.5	0.
315	O	+CO2	-->CO	+O2		.3D-10	.0	26500.
316	O	+HNO	-->O2	+NH		.2D-12	.5	3500.
317	O	+HNO	-->OH	+NO		.8D-12	.5	0.
318	O	+HNO	-->NO2	+H		.8D-13	.5	0.
319	O	+HO2	-->OH	+O2		.5D-10	.0	0.
320	O	+N2O	-->O2	+N2		.2D-09	.0	14100.
321	O	+NO2	-->NO	+O2		.9D-11	.0	0.
322	O	+C2H2	-->C2H	+OH		.5D-08	.0	8520.
323	O	+H2O2	-->OH	+HO2		.1D-11	.0	2000.
324	O	+H3CO	-->O2	+CH3		.3D-10	.0	0.
325	O	+H3CO	-->OH	+H2CO		.3D-11	.0	0.
326	O	+CN	-->CO	+N		.2D-10	.0	0.
327	O	+OCN	-->NO	+CO		.7D-10	.0	0.
328	O	+OCN	-->O2	+CN		.7D-10	.0	0.
329	O	+HCN	-->OCN	+H		.2D-17	2.1	3075.
330	O	+HCN	-->CO	+NH		.2D-17	2.1	3075.
331	O	+CH3OOH	-->OH	+CH3O2		.7D-12	.6	1390.
332	O	+C2H	-->CO	+CH		.2D-10	.0	0.
333	O	+C2H2	-->CHCO	+H		.2D-19	2.8	250.
334	O	+C2H3	-->OH	+C2H2		.5D-10	.0	0.
335	O	+C2H3	-->CO	+CH3		.5D-10	.0	0.
336	O	+C2H3	-->HCO	+CH2		.5D-10	.0	0.
337	O	+C2H4	-->CH2CHO	+H		.6D-17	2.1	0.
338	O	+C2H4	-->CH2CO	+H2		.6D-17	2.1	0.
339	O	+C2H5	-->CH3CHO	+H		.1D-09	.0	0.

340	O	+C2H5	-->HCHO	+CH3		.1D-09	.0	0.
341	O	+C2H6	-->OH	+C2H5		.2D-14	1.5	2920.
342	O	+CH2CO	-->HCHO	+CO		.4D-11	.0	680.
343	O	+CH2CO	-->HCO	+HCO		.4D-11	.0	680.
344	O	+CH3CHO	-->OH	+CH3CO		.1D-10	.0	910.
345	O	+CH3CHO	-->OH	+CH2CHO		.1D-10	.0	910.
346	O	+C6H6	-->OH	+C6H5		.1D-21	3.7	570.
347	O	+C6H6	-->C6H5OH			.1D-21	3.7	570.
348	O	+C6H5CH2	-->HCO	+C6H6		.5D-09	.0	0.
349	O	+CHO	-->OH	+CO		.5D-10	.0	0.
350	O	+CHO	-->CO2	+H		.5D-10	.0	0.
351	O	+HCHO	-->OH	+CHO		.7D-12	.6	1390.
352	N	+CH	-->NH	+C		.2D-11	.5	6995.
353	N	+H2	-->NH	+H		.4D-11	.5	10700.
354	N	+CH2	-->NH	+CH		.1D-11	.7	20400.
355	N	+HCO	-->O	+HCN		.2D-09	.0	0.
356	N	+HCO	-->NH	+CO		.3D-12	.5	1000.
357	N	+HNO	-->N2O	+H		.8D-13	.5	1500.
358	N	+HNO	-->NO	+NH		.2D-12	.5	1000.
359	N	+NO2	-->N2	+O2		.2D-11	.0	0.
360	N	+NO2	-->NO	+NO		.7D-11	.0	0.
361	N	+NO2	-->N2O	+O		.2D-10	.0	0.
362	N	+OCN	-->N2	+CO		.3D-10	.0	0.
363	C	+CH	-->C2	+H		.1D-11	.5	0.
364	C	+CN	-->C2	+N		.4D-12	.5	19300.
365	C	+CO	-->C2	+O		.2D-11	.5	58025.
366	C	+H2	-->CH	+H		.3D-11	.5	14100.
367	N2	+C	-->CN	+N		.2D-11	.5	22750.
368	N2	+O	-->NO	+N		.1D-09	.0	38000.
369	N2	+CH	-->HCN	+N		.2D-12	.0	9560.
370	N2	+H	-->N	+N	+H	.7D-02	-1.6	113240.
371	N2	+H2	-->N	+N	+H2	.7D-02	-1.6	113240.
372	N2	+CO	-->N	+OCN		.6D-14	1.2	88900.
373	N2	+OH	-->NH	+NO		.1D-09	.2	49000.
374	N2	+H2O	-->NH2	+NO		.6D-11	-.3	62050.
375	N2	+CO2	-->OCN	+NO		.2D-09	.3	77100.
376	CO2	+N	-->NO	+CO		.3D-12	.0	1700.
377	CO2	+CH	-->CO	+HCO		.2D-13	.5	3000.
378	CO2	+H2	-->CH2	+O2		.3D-05	.7	94850.
379	CO2	+CH	-->C2H	+O2		.6D-13	.2	43400.
380	CO2	+HCO	-->CHCO	+O2		.3D-11	.0	63029.
381	CO2	+H	-->O	+CHO		.6D-05	-.7	56600.
382	CO	+H	-->OH	+C		.6D-11	.5	77700.
383	CO	+OH	-->CO2	+H		.1D-16	1.5	-250.
384	CO	+H	-->C	+O	+H	.6D-08	.0	129000.
385	CO	+H2	-->C	+O	+H2	.6D-08	.0	129000.
386	CO	+N	-->O	+CN		.5D-10	.1	38700.
387	CO	+NH	-->O	+HCN		.2D-20	2.8	19375.
388	CO	+CH	-->O	+C2H		.5D-13	.7	39000.
389	CO	+CH3	-->O	+C2H3		.5D-12	.6	59800.

390	CO	+OH	-->CH	+O2		.5D-11	.4	79900.
391	CO	+H2O	-->CH2	+O2		.1D-10	.5	89550.
392	CO	+HO2	-->CHO	+O2		.2D-11	.2	17200.
393	C2H	+O2	-->HCO	+CO		.3D-10	.0	0.
394	C2H	+H2	-->C2H2	+H		.3D-10	.0	1560.
395	C2H	+CH4	-->C2H2	+CH3		.3D-11	.0	250.
396	C2H	+O2	-->CO2	+CH		.3D-10	.0	0.
397	C2H	+O2	-->CO	+CO	+H	.3D-10	.0	0.
398	C2H	+O2	-->C2HO	+O		.3D-11	.0	0.
399	C4H	+H2	-->C4H2	+H		.6D-11	.0	1450.
400	C4H	+C2H2	-->C6H2	+H		.1D-10	.0	0.
401	C4H2	+C2H	-->C6H2	+H		.7D-10	.0	0.
402	C4H2	+H	-->C2H2	+C2H		.7D-10	.0	74465.
403	C4H2	+H	-->C4H	+H2		.6D-11	.0	3565.
404	C6H2	+H	-->C4H2	+C2H		.7D-10	.0	15456.
405	C6H2	+H	-->C4H	+C2H2		.1D-10	.0	-1548.
406	C4H3	+H	-->C2H2	+C2H2		.2D-10	.0	503.
407	H3CO	+O2	-->HCHO	+HO2		.7D-13	.0	1070.
408	CHCO	+O2	-->CO2	+HCO		.3D-11	.0	-430.
409	CHCO	+H	-->O	+C2H2		.5D-25	4.2	23750.
410	CH2CHO	+H	-->O	+C2H4		.4D-16	1.7	7030.
411	CH2CO	+H2	-->O	+C2H4		.2D-16	1.9	42280.
412	CH3CHO	+H	-->O	+C2H5		.8D-06	-.8	37900.
413	C2H6	+C2H4	-->C2H5	+C2H5		.1D-06	-.6	3220.
414	C6H5OH		-->O	+C6H6		.3D-10	3.9	51981.
415	HNCO	+H	-->CN	+H2O		.3D-06	-.9	2257.
416	CH2OH	+CO	-->OH	+CH2CO		.8D-13	.5	13700.
417	N2H	+O	-->NH	+NO		.1D-08	-.3	-5530.
418	N2H	+OH	-->NH2	+NO		.5D-11	-.2	-1007.
419	C2HO	+O	-->C2H	+O2		.1D-08	-.6	16200.
420	HCHO	+H2	-->CHO	+H	+H2	.6D-06	.0	43680.
421	HCHO	+CH3	-->O	+C2H5		.2D-11	.5	40200.
422	HCHO	+CO	-->O	+CH2CO		.2D-15	-1.3	51280.
423	HCHO	+O	-->CH2	+O2		.9D-08	-.3	31550.
424	HCHO	+HO2	-->H3CO	+O2		.1D-13	.3	15570.
425	HCHO	+CHO	-->C2H3	+O2		.4D-12	.3	43000.
426	HCHO	+CO	-->CHO	+CHO		.2D-08	.2	37773.
427	HCHO	+OH	-->CH3	+O2		.1D-12	.2	31300.
428	CHO	+O2	-->OH	+CO2		.5D-11	.0	0.
429	CHO	+CHO	-->HCHO	+CO		.5D-10	.0	0.
430	CHO	+O2	-->CO	+HO2		.5D-11	.0	0.
431	CHO	+O	-->CH	+O2		.1D-09	.0	36300.

Si–Chemie

Quelle: [Millar *et al.* 1991] und [Britten *et al.* 1990].

Chemische Reaktionen:						k_0	α	C
1	SI	+OH	-->SIO	+H		.1D-11	.5	0.
2	SI	+O2	-->SIO	+O		.2D-10	.5	0.
3	SIH	+C	-->SIC	+H		.3D-11	.5	0.
4	SIH	+O	-->SIO	+H		.2D-11	.5	0.
5	SIH2	+O2	-->HSIO	+OH		.2D-09	.0	1850.
6	SIH2	+H2	-->SIH4			.1D-15	.0	1330.
7	SIH2	+O	-->SIO	+H	+H	.3D-11	.5	0.
8	SIH3	+H2O	-->SIH4	+OH		.8D-11	.0	14750.
9	SIH3	+OH	-->SIH4	+O		.4D-12	.0	6900.
10	SIH3	+H2O2	-->SIH4	+HO2		.8D-12	.0	3115.
11	SIH3	+SIH3O2H	-->SIH4	+SIH3O2		.1D-11	.0	3045.
12	SIH3	+H2	-->SIH4	+H		.3D-11	.0	8400.
13	SIH3	+HO2	-->SIH4	+O2		.5D-11	.0	1270.
14	SIH3	+SIH3OH	-->SIH4	+SIH3O		.2D-14	.0	25000.
15	SIH3	+H	-->SIH4			.4D-13	.0	-80.
16	SIH4	+OH	-->SIH3	+H2O		.1D-10	.0	48.
17	SIH4	+O	-->SIH3	+OH		.7D-11	.0	790.
18	SIH4	+HO2	-->SIH3	+H2O2		.3D-11	.0	5000.
19	SIH4	+H	-->SIH3	+H2		.3D-10	.0	1250.
20	SIH4	+O2	-->SIH3	+HO2		.1D-09	.0	22000.
21	SIH4	+SIH3O	-->SIH3	+SIH3OH		.3D-12	.0	2650.
22	SIH4	+SIH3O2	-->SIH3	+SIH3O2H		.2D-10	.0	9250.
23	SIH4		-->SIH2	+H2		.5D+13	.0	26100.
24	SIH4		-->SIH3	+H		.4D+16	.0	46500.
25	SIC	+N	-->CN	+SI		.1D-11	.5	0.
26	SIC	+O	-->SIO	+C		.1D-11	.5	0.
27	SIC	+O	-->CO	+SI		.1D-11	.5	0.
28	HSIO	+OH	-->SIH2	+O2		.1D-16	.0	22300.
29	HSIO	+H2	-->SIH2O	+H		.4D-11	.0	12600.
30	HSIO	+H2O2	-->SIH2O	+HO2		.4D-13	.0	3295.
31	HSIO	+H2	-->H	+SIO	+H2	.8D-09	.0	14500.
32	HSIO	+H	-->H	+SIO	+H	.8D-09	.0	14500.
33	HSIO	+H	-->SIO	+H2		.3D-09	.0	0.
34	HSIO	+O	-->SIO	+OH		.2D-09	.0	0.
35	HSIO	+OH	-->SIO	+H2O		.2D-09	.0	0.
36	HSIO	+O2	-->SIO	+HO2		.5D-11	.0	0.
37	HSIO	+OH	-->SIH2O	+O		.3D-11	.0	8600.
38	HSIO	+HO2	-->SIH2O	+O2		.2D-09	.0	1500.
39	HSIO	+SIH3O	-->SIO	+SIH3OH		.2D-11	.0	0.
40	SIO	+OH	-->SIO2	+H		.6D-12	.5	0.
41	SIO	+H2	-->HSIO	+H		.2D-08	.0	45000.
42	SIO	+OH	-->HSIO	+O		.5D-09	.0	43950.
43	SIO	+H2O	-->HSIO	+OH		.5D-08	.0	52500.
44	SIO	+HO2	-->HSIO	+O2		.9D-11	.0	17150.
45	SIO	+O2	-->SIO2	+O		.2D-10	.0	3250.

46	SIO	+H	-->SI	+O	+H	.6D-08	.0	96000.
47	SIO	+H2	-->SI	+O	+H2	.6D-08	.0	96000.
48	SIO	+SIH3OH	-->HSIO	+SIH3O		.1D-13	.0	9000.
49	SIO2	+O	-->SIO	+O2		.2D-10	.0	8750.
50	SIO2	+H	-->SIO	+OH		.7D-11	.0	5350.
51	SIO2	+H2	-->SIO	+O	+H2	.5D-16	.0	57185.
52	SIO2	+H	-->SIO	+O	+H	.5D-16	.0	57185.
53	SIH2O	+HO2	-->HSIO	+H2O2		.2D-11	.0	4000.
54	SIH2O	+O	-->HSIO	+OH		.3D-10	.0	1540.
55	SIH2O	+H	-->HSIO	+H2		.5D-09	.0	5250.
56	SIH2O	+HO2	-->SIH3O	+O2		.6D-10	.0	16100.
57	SIH2O	+O2	-->HSIO	+HO2		.7D-09	.0	14750.
58	SIH2O	+H2O	-->HSIOOH	+H2		.2D-10	.0	0.
59	SIH2O	+HO2	-->HSIOOH	+OH		.0D+00	.0	0.
60	SIH2O	+OH	-->HSIOOH	+H		.2D-10	.0	0.
61	SIH3O	+SIH2O	-->SIH3OH	+HSIO		.2D-12	.0	486.
62	SIH3O	+O2	-->SIH2O	+HO2		.2D-11	.0	2250.
63	SIH3O	+OH	-->SIH3O2H			.4D-13	.0	31000.
64	SIH3O2	+SIH2O	-->SIH3O2H	+O2		.2D-12	.0	3400.
65	SIH3O2	+HO2	-->SIH3O2H	+O2		.7D-13	.0	0.
66	SIH3O2	+H2	-->SIH3O2H	+H		.2D-09	.0	8000.
67	SIH3O2H	+O2	-->SIH3O2	+SIH2O		.4D-13	.0	5050.
68	SIH3O2H		-->SIH3O	+OH		.7D+15	.0	24350.
69	SIH3O2H	+O2	-->SIH3O2	+HO2		.5D-11	.0	19500.
70	SIH3O2H	+H	-->SIH3O2	+H2		.1D-08	.0	3975.
71	SIH3OH	+HSIO	-->SIH3O	+SIH2O		.9D-11	.0	9100.
72	SIH3OH	+H	-->SIH2OH	+H2		.5D-10	.0	2650.
73	SIH3OH	+O	-->SIH2OH	+OH		.3D-11	.0	865.
74	SIH3OH	+OH	-->SIH2OH	+H2O		.7D-11	.0	750.
76	SIH3OH	+SIH3O2	-->SIH2OH	+SIH3O2H		.1D-10	.0	7250.
77	SIH3OH	+SIH3	-->SIH2OH	+SIH4		.3D-12	.0	3700.
78	SIH3OH	+O2	-->SIH2OH	+HO2		.7D-10	.0	22500.
79	SIH3OH	+HO2	-->SIH2OH	+H2O2		.1D-10	.0	7000.
80	SIH2OH	+H2	-->SIH3OH	+H		.7D-12	.0	6500.
81	SIH2OH	+OH	-->SIH3OH	+O		.2D-13	.0	3900.
82	SIH2OH	+H2O	-->SIH3OH	+OH		.4D-12	.0	12500.
83	SIH2OH	+SIH4	-->SIH3OH	+SIH3		.3D-13	.0	650.
84	SIH2OH	+SIH3O2H	-->SIH3OH	+SIH3O2		.2D-14	.0	5000.
85	SIH2OH	+HO2	-->SIH3OH	+O2		.3D-12	.0	675.
86	SIH2OH	+H2O2	-->SIH3OH	+HO2		.2D-12	.0	2050.
87	SIH2OH	+O2	-->HSIOOH	+OH		.2D-10	.0	3500.
88	HSIOOH	+OH	-->SIH2OH	+O2		.2D-08	.0	60000.
89	HSIOOH	+H2	-->SIH2O	+H2O		.2D-11	.0	20000.
90	HSIOOH	+H	-->SIH2O	+OH		.2D-11	.0	20000.
91	HSIOOH	+OH	-->SIH2O	+HO2		.0D+00	.0	0.
92	HSIOOH	+O2	-->SIOOH	+HO2		.3D-10	.0	8000.
93	HSIOOH		-->SIOOH	+H		.5D+15	.0	32500.
94	SIOOH	+HO2	-->HSIOOH	+O2		.3D-13	.0	2490.
95	SIOOH	+H	-->HSIOOH			.2D-11	.0	10000.

S–Chemie

Quelle: [Millar *et al.* 1991].

Chemische Reaktionen:					k_0	α	C
1	HS	+H	-->S	+H2	.3D-10	.0	0.
2	HS	+H2	-->H2S	+H	.4D-11	.1	8050.
3	HS	+C	-->CS	+H	.2D-10	.0	0.
4	HS	+C	-->CH	+S	.4D-12	.6	5880.
5	HS	+N	-->NH	+S	.1D-11	.5	9060.
6	HS	+O	-->SO	+H	.2D-09	.0	0.
7	HS	+O	-->OH	+S	.1D-11	.0	4000.
8	HS	+HS	-->H2S	+S	.1D-10	.0	0.
9	HS	+CO	-->OCS	+H	.1D-15	1.1	8330.
10	H2S	+H	-->HS	+H2	.2D-16	2.1	352.
12	H2S	+O	-->HS	+OH	.1D-10	.0	1920.
12	H2S	+OH	-->H2O	+HS	.6D-11	.0	80.
13	H2S	+CH3	-->HS	+CH4	.3D-12	.0	1105.
14	SO	+H	-->OH	+S	.3D-08	-.3	11100.
15	SO	+H	-->HS	+O	.1D-11	.5	19930.
16	SO	+C	-->CO	+S	.7D-10	.0	0.
17	SO	+C	-->CS	+O	.2D-09	.0	0.
18	SO	+O	-->S	+O2	.7D-12	.0	2760.
19	SO	+N	-->NO	+S	.1D-11	.5	750.
20	SO	+OH	-->SO2	+H	.9D-10	.0	0.
21	SO	+O2	-->SO2	+O	.1D-12	.0	2280.
22	SO2	+O	-->SO	+O2	.8D-11	.0	9800.
23	CS	+N	-->CN	+S	.2D-11	.5	1160.
24	CS	+C	-->C2	+S	.8D-12	.5	20435.
25	CS	+O	-->CO	+S	.3D-09	.0	760.
26	CS	+O	-->SO	+C	.3D-11	.5	28940.
27	CS	+OH	-->OCS	+H	.2D-15	1.1	800.
28	HCS	+N	-->HCN	+S	.1D-11	.5	0.
29	HCS	+O	-->OCS	+H	.2D-11	.5	0.
30	OCS	+O	-->CO	+SO	.2D-10	.0	2150.
31	OCS	+H	-->CO	+HS	.9D-11	.0	1937.
32	S	+H2	-->HS	+H	.5D-10	.1	9620.
33	S	+CH	-->HS	+C	.1D-11	.5	4000.
34	S	+CH	-->CS	+H	.1D-11	.0	0.
35	S	+CH2	-->HCS	+H	.2D-11	.5	0.
36	S	+NH	-->HS	+N	.1D-11	.5	4000.
37	S	+OH	-->SO	+H	.7D-10	.0	0.
38	S	+OH	-->HS	+O	.7D-10	.0	0.
39	S	+C2	-->CS	+C	.1D-11	.5	0.
40	S	+CN	-->CS	+N	.1D-11	.5	0.
41	S	+NO	-->SO	+N	.7D-12	.5	17260.
42	S	+O2	-->SO	+O	.1D-12	.5	0.

Ionenreaktionen

CRP steht für *cosmic–ray proton* und ELECTR für *electron*.

Quelle: [Millar *et al.* 1991] und [Umebayashi & Nakano 1981].

Chemische Reaktionen:						k_0	α	C
1	H+	+SI	-->SI+	+H		.1D-08	.0	0.
2	H+	+S	-->S+	+H		.1D-08	.0	0.
3	H+	+H-	-->H	+H		.4D-05	-.5	0.
4	H+	+H2	-->H2+	+H		.1D-09	.0	21200.
5	H+	+C-	-->H	+C		.4D-05	-.5	0.
6	H+	+CH	-->CH+	+H		.2D-08	.0	0.
7	H+	+CH2	-->CH+	+H2		.1D-08	.0	0.
8	H+	+CH2	-->CH2+	+H		.1D-08	.0	0.
9	H+	+NH	-->NH+	+H		.2D-08	.0	0.
10	H+	+CH3	-->CH3+	+H		.3D-08	.0	0.
11	H+	+O	-->O+	+H		.7D-09	.0	232.
12	H+	+NH2	-->NH2+	+H		.3D-08	.0	0.
13	H+	+CH4	-->CH3+	+H2		.2D-08	.0	0.
14	H+	+CH4	-->CH4+	+H		.2D-08	.0	0.
15	H+	+OH	-->OH+	+H		.2D-08	.0	0.
16	H+	+NH3	-->NH3+	+H		.1D-08	.0	0.
17	H+	+H2O	-->H2O+	+H		.7D-08	.0	0.
18	H+	+HCN	-->HCN+	+H		.1D-07	.0	0.
19	H+	+SIH	-->SIH+	+H		.2D-08	.0	0.
20	H+	+SIH	-->SI+	+H2		.2D-08	.0	0.
21	H+	+HCO	-->CO+	+H2		.9D-09	.0	0.
22	H+	+HCO	-->H2+	+CO		.9D-09	.0	0.
23	H+	+HCO	-->HCO+	+H		.9D-09	.0	0.
24	H+	+SIH2	-->SIH2+	+H		.2D-08	.0	0.
25	H+	+SIH2	-->SIH+	+H2		.2D-08	.0	0.
26	H+	+H2CO	-->HCO+	+H2		.4D-08	.0	0.
27	H+	+H2CO	-->CO+	+H2	+H	.1D-08	.0	0.
28	H+	+SIH3	-->SIH2+	+H2		.2D-08	.0	0.
29	H+	+HS	-->S+	+H2		.2D-08	.0	0.
30	H+	+H2S	-->H2S+	+H		.7D-08	.0	0.
31	H+	+SIC	-->SIC+	+H		.3D-08	.0	0.
32	H+	+SIO	-->SIO+	+H		.3D-08	.0	0.
33	H+	+CS	-->CS+	+H		.5D-08	.0	0.
34	H+	+CO2	-->HCO+	+O		.4D-08	.0	0.
35	H+	+HCS	-->CS+	+H2		.4D-08	.0	0.
36	H+	+SO	-->SO+	+H		.3D-08	.0	0.
37	H+	+SO2	-->SO+	+OH		.2D-08	.0	0.
38	H-	+H	-->H2	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
39	H-	+C	-->CH	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
40	H-	+N	-->NH	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
41	H-	+O	-->OH	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
42	H-	+CH	-->CH2	+ELECTR		.1D-09	.0	0.
43	H-	+CH2	-->CH3	+ELECTR		.1D-08	.0	0.

44	H-	+NH	-->NH2	+ELECTR		.1D-09	.0	0.
45	H-	+CH3	-->CH4	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
46	H-	+NH2	-->NH3	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
47	H-	+OH	-->H2O	+ELECTR		.1D-09	.0	0.
48	H-	+C2	-->C2H	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
49	H-	+C2H	-->C2H2	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
50	H-	+CN	-->HCN	+ELECTR		.1D-09	.0	0.
51	H-	+CO	-->HCO	+ELECTR		.5D-10	.0	0.
52	H-	+HCO	-->H2CO	+ELECTR		.1D-08	.0	0.
53	H2+	+H	-->H+	+H2		.6D-09	.0	0.
54	H2+	+C	-->CH+	+H		.2D-08	.0	0.
55	H2+	+N	-->NH+	+H		.2D-08	.0	0.
56	H2+	+O	-->OH+	+H		.2D-08	.0	0.
57	H2+	+H-	-->H	+H2		.4D-05	-.5	0.
58	H2+	+H2	-->H3+	+H		.2D-08	.0	0.
59	H2+	+CH	-->CH+	+H2		.7D-09	.0	0.
60	H2+	+CH	-->CH2+	+H		.7D-09	.0	0.
61	H2+	+CH2	-->CH3+	+H		.1D-08	.0	0.
62	H2+	+CH2	-->CH2+	+H2		.1D-08	.0	0.
63	H2+	+NH	-->NH2+	+H		.8D-09	.0	0.
64	H2+	+NH	-->NH+	+H2		.8D-09	.0	0.
65	H2+	+NH2	-->NH2+	+H2		.2D-08	.0	0.
66	H2+	+CH4	-->CH4+	+H2		.1D-08	.0	0.
67	H2+	+CH4	-->CH5+	+H		.1D-09	.0	0.
68	H2+	+CH4	-->CH3+	+H	+H2	.2D-08	.0	0.
69	H2+	+OH	-->OH+	+H2		.8D-09	.0	0.
70	H2+	+OH	-->H2O+	+H		.8D-09	.0	0.
71	H2+	+NH3	-->NH3+	+H2		.6D-08	.0	0.
72	H2+	+H2O	-->H2O+	+H2		.4D-08	.0	0.
73	H2+	+H2O	-->H3O+	+H		.3D-08	.0	0.
74	H2+	+CN	-->HCN+	+H		.1D-08	.0	0.
75	H2+	+HCN	-->HCN+	+H2		.3D-08	.0	0.
76	H2+	+CO	-->CO+	+H2		.6D-09	.0	0.
77	H2+	+CO	-->HCO+	+H		.2D-08	.0	0.
78	H2+	+HCO	-->H3+	+CO		.1D-08	.0	0.
79	H2+	+HCO	-->HCO+	+H2		.1D-08	.0	0.
80	H2+	+H2CO	-->HCO+	+H	+H2	.1D-08	.0	0.
81	H2+	+H2S	-->H2S+	+H2		.3D-08	.0	0.
82	H2+	+H2S	-->S+	+H2	+H2	.8D-09	.0	0.
83	H3+	+C	-->CH+	+H2		.2D-08	.0	0.
84	H3+	+O	-->OH+	+H2		.8D-09	.0	0.
85	H3+	+SI	-->SIH+	+H2		.4D-08	.0	0.
86	H3+	+H-	-->H2	+H2		.4D-05	-.5	0.
87	H3+	+CH	-->CH2+	+H2		.1D-08	.0	0.
88	H3+	+CH2	-->CH3+	+H2		.2D-08	.0	0.
89	H3+	+NH	-->NH2+	+H2		.1D-08	.0	0.
90	H3+	+CH3	-->CH4+	+H2		.2D-08	.0	0.
91	H3+	+NH2	-->NH3+	+H2		.2D-08	.0	0.
92	H3+	+CH4	-->CH5+	+H2		.2D-08	.0	0.
93	H3+	+OH	-->H2O+	+H2		.1D-08	.0	0.

94	H3+	+NH3	-->NH4+	+H2			.3D-08	.0	0.
95	H3+	+H2O	-->H3O+	+H2			.6D-08	.0	0.
96	H3+	+CN	-->HCN+	+H2			.2D-08	.0	0.
97	H3+	+CO	-->HCO+	+H2			.2D-08	.0	0.
98	H3+	+SIH	-->SIH2+	+H2			.2D-08	.0	0.
99	H3+	+HS	-->H2S+	+H2			.2D-08	.0	0.
100	H3+	+CS	-->HCS+	+H2			.3D-08	.0	0.
101	HE+	+H	-->H+	+HE			.2D-14	.0	0.
102	HE+	+SI	-->SI+	+HE			.3D-08	.0	0.
103	HE+	+H-	-->H	+HE			.4D-05	-.5	0.
104	HE+	+H2	-->H+	+H	+HE		.4D-13	.0	35.
105	HE+	+H2	-->H2+	+HE			.7D-14	.0	0.
106	HE+	+C	-->C+	+HE			.9D-16	.8	0.
107	HE+	+C-	-->C	+HE			.4D-05	-.5	0.
108	HE+	+CH	-->C+	+H	+HE		.1D-08	.0	0.
109	HE+	+CH	-->CH+	+HE			.5D-09	.0	0.
110	HE+	+CH2	-->CH+	+H	+HE		.8D-09	.0	0.
111	HE+	+CH2	-->C+	+H2	+HE		.8D-09	.0	0.
112	HE+	+NH	-->N+	+H	+HE		.1D-08	.0	0.
113	HE+	+CH3	-->CH+	+H2	+HE		.2D-08	.0	0.
114	HE+	+NH2	-->NH+	+H	+HE		.8D-09	.0	0.
115	HE+	+NH2	-->N+	+H2	+HE		.8D-09	.0	0.
116	HE+	+CH4	-->CH3	+H+	+HE		.5D-09	.0	0.
117	HE+	+CH4	-->CH+	+H2	+HE	+H	.2D-09	.0	0.
118	HE+	+CH4	-->CH2+	+H2	+HE		.9D-09	.0	0.
119	HE+	+CH4	-->CH3+	+HE	+H		.9D-10	.0	0.
120	HE+	+CH4	-->CH4+	+HE			.5D-10	.0	0.
121	HE+	+OH	-->O+	+H	+HE		.1D-08	.0	0.
122	HE+	+NH3	-->NH3+	+HE			.3D-09	.0	0.
123	HE+	+NH3	-->NH+	+H2	+HE		.2D-09	.0	0.
124	HE+	+NH3	-->NH2+	+H	+HE		.2D-08	.0	0.
125	HE+	+H2O	-->H+	+OH	+HE		.2D-09	.0	0.
126	HE+	+H2O	-->OH+	+H	+HE		.3D-09	.0	0.
127	HE+	+H2O	-->H2O+	+HE			.6D-10	.0	0.
128	HE+	+C2	-->C+	+C	+HE		.2D-08	.0	0.
129	HE+	+C2H	-->CH+	+C	+HE		.5D-09	.0	0.
130	HE+	+C2H	-->C+	+CH	+HE		.5D-09	.0	0.
131	HE+	+C2H2	-->CH+	+CH	+HE		.8D-09	.0	0.
132	HE+	+CN	-->C+	+N	+HE		.9D-09	.0	0.
133	HE+	+CN	-->N+	+C	+HE		.9D-09	.0	0.
134	HE+	+HCN	-->CH+	+N	+HE		.7D-09	.0	0.
135	HE+	+HCN	-->N+	+CH	+HE		.2D-09	.0	0.
136	HE+	+HCN	-->C+	+N	+HE	+H	.8D-09	.0	0.
137	HE+	+CO	-->C+	+O	+HE		.2D-08	.0	0.
138	HE+	+C2H4	-->CH2+	+CH2	+HE		.5D-09	.0	0.
139	HE+	+N2	-->N+	+N	+HE		.1D-08	.0	0.
140	HE+	+SIH	-->SI+	+H	+HE		.2D-08	.0	0.
141	HE+	+HCO	-->CO+	+H	+HE		.5D-09	.0	0.
142	HE+	+HCO	-->CH+	+O	+HE		.5D-09	.0	0.
143	HE+	+NO	-->O+	+N	+HE		.2D-09	.0	0.

144	HE+	+NO	-->N+	+O	+HE	.1D-08	.0	0.
145	HE+	+SIH2	-->SIH+	+H	+HE	.1D-08	.0	0.
146	HE+	+SIH2	-->SI+	+H2	+HE	.1D-08	.0	0.
147	HE+	+H2CO	-->CO+	+H2	+HE	.2D-08	.0	0.
148	HE+	+H2CO	-->HCO+	+H	+HE	.1D-08	.0	0.
149	HE+	+H2CO	-->CH2+	+O	+HE	.2D-08	.0	0.
150	HE+	+HNO	-->H+	+NO	+HE	.1D-08	.0	0.
151	HE+	+SIH3	-->SIH2+	+H	+HE	.1D-08	.0	0.
152	HE+	+SIH3	-->SIH+	+H2	+HE	.1D-08	.0	0.
153	HE+	+O2	-->O+	+O	+HE	.1D-08	.0	0.
154	HE+	+SIH4	-->SIH2+	+H2	+HE	.1D-08	.0	0.
155	HE+	+HS	-->S+	+H	+HE	.2D-08	.0	0.
156	HE+	+H2S	-->H2S+	+HE		.3D-09	.0	0.
157	HE+	+H2S	-->S+	+H2	+HE	.4D-08	.0	0.
158	HE+	+SIC	-->C+	+SI	+HE	.2D-08	.0	0.
159	HE+	+SIC	-->SI+	+C	+HE	.2D-08	.0	0.
160	HE+	+OCN	-->O+	+CN	+HE	.3D-08	.0	0.
161	HE+	+CH2CO	-->CH2+	+CO	+HE	.1D-08	.0	0.
162	HE+	+CH2CO	-->CO+	+CH2	+HE	.1D-08	.0	0.
163	HE+	+SIO	-->SI+	+O	+HE	.9D-09	.0	0.
164	HE+	+SIO	-->O+	+SI	+HE	.9D-09	.0	0.
165	HE+	+CS	-->S+	+C	+HE	.1D-08	.0	0.
166	HE+	+CS	-->C+	+S	+HE	.1D-08	.0	0.
167	HE+	+CO2	-->O+	+CO	+HE	.1D-09	.0	0.
168	HE+	+CO2	-->CO+	+O	+HE	.9D-09	.0	0.
169	HE+	+CO2	-->C+	+O2	+HE	.4D-10	.0	0.
170	HE+	+N2O	-->N+	+NO	+HE	.3D-09	.0	0.
171	HE+	+N2O	-->O+	+N2	+HE	.3D-09	.0	0.
172	HE+	+CH3CHO	-->CH3+	+HCO	+HE	.3D-08	.0	0.
173	HE+	+HCS	-->H+	+CS	+HE	.1D-08	.0	0.
174	HE+	+HCS	-->CS+	+H	+HE	.1D-08	.0	0.
175	HE+	+SO	-->O+	+S	+HE	.8D-09	.0	0.
176	HE+	+SO	-->S+	+O	+HE	.8D-09	.0	0.
177	HE+	+OCS	-->CS+	+O	+HE	.8D-09	.0	0.
178	HE+	+OCS	-->S+	+CO	+HE	.8D-09	.0	0.
179	HE+	+OCS	-->CO+	+S	+HE	.8D-09	.0	0.
180	HE+	+OCS	-->O+	+CS	+HE	.8D-09	.0	0.
181	HE+	+SIO2	-->SI+	+O2	+HE	.2D-08	.0	0.
182	HE+	+SO2	-->S+	+O2	+HE	.9D-09	.0	0.
183	HE+	+SO2	-->SO+	+O	+HE	.3D-08	.0	0.
184	C+	+SI	-->SI+	+C		.2D-08	.0	0.
185	C+	+S	-->S+	+C		.2D-08	.0	0.
186	C+	+H-	-->H	+C		.4D-05	-.5	0.
187	C+	+H2	-->CH+	+H		.1D-09	.0	4640.
188	C+	+C-	-->C	+C		.4D-05	-.5	0.
189	C+	+CH	-->CH+	+C		.4D-09	.0	0.
190	C+	+CH2	-->CH2+	+C		.5D-09	.0	0.
191	C+	+NH2	-->HCN+	+H		.1D-08	.0	0.
192	C+	+OH	-->CO+	+H		.8D-09	.0	0.
193	C+	+NH3	-->NH3+	+C		.5D-09	.0	0.

194	C+	+NH3	-->HCN+	+H2		.7D-10	.0	0.
195	C+	+H2O	-->HCO+	+H		.9D-09	.0	0.
196	C+	+SIH	-->SIC+	+H		.1D-08	.0	0.
197	C+	+HCO	-->HCO+	+C		.5D-09	.0	0.
198	C+	+HCO	-->CH+	+CO		.5D-09	.0	0.
199	C+	+SIH2	-->SIH2+	+C		.1D-08	.0	0.
200	C+	+SIH2	-->SIC+	+H2		.1D-08	.0	0.
201	C+	+H2CO	-->CH2+	+CO		.2D-08	.0	0.
202	C+	+H2CO	-->HCO+	+CH		.8D-09	.0	0.
203	C+	+O2	-->CO+	+O		.4D-09	.0	0.
204	C+	+O2	-->O+	+CO		.6D-09	.0	0.
205	C+	+HS	-->CS+	+H		.1D-08	.0	0.
206	C+	+H2S	-->HCS+	+H		.1D-08	.0	0.
207	C+	+H2S	-->H2S+	+C		.6D-09	.0	0.
208	C+	+SIC	-->SI+	+C2		.2D-08	.0	0.
209	C+	+SIC	-->SIC+	+C		.2D-08	.0	0.
210	C+	+OCN	-->CO+	+CN		.4D-08	.0	0.
211	C+	+SIO	-->SI+	+CO		.5D-09	.0	0.
212	C+	+CO2	-->CO+	+CO		.1D-08	.0	0.
213	C+	+SO	-->S+	+CO		.3D-09	.0	0.
214	C+	+SO	-->CS+	+O		.3D-09	.0	0.
215	C+	+SO	-->SO+	+C		.3D-09	.0	0.
216	C+	+SO	-->CO+	+S		.3D-09	.0	0.
217	C+	+OCS	-->CS+	+CO		.2D-08	.0	0.
218	C+	+SO2	-->SO+	+CO		.2D-08	.0	0.
219	C-	+H	-->CH	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
220	C-	+C	-->C2	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
221	C-	+N	-->CN	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
222	C-	+O	-->CO	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
223	C-	+H2	-->CH2	+ELECTR		.1D-12	.0	0.
224	C-	+CH	-->C2H	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
225	C-	+CH2	-->C2H2	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
226	C-	+NH	-->HCN	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
227	C-	+OH	-->HCO	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
228	C-	+H2O	-->H2CO	+ELECTR		.5D-09	.0	0.
229	C-	+O2	-->CO2	+ELECTR		.5D-10	.0	0.
230	C-	+CO2	-->CO	+ELECTR	+CO	.5D-09	.0	0.
231	CH+	+H	-->C+	+H2		.1D-07	-.5	0.
232	CH+	+O	-->CO+	+H		.4D-09	.0	0.
233	CH+	+SI	-->SI+	+CH		.2D-09	.0	0.
234	CH+	+S	-->S+	+CH		.5D-09	.0	0.
235	CH+	+S	-->CS+	+H		.5D-09	.0	0.
236	CH+	+H2	-->CH2+	+H		.1D-08	.0	0.
237	CH+	+NH2	-->HCN+	+H2		.1D-08	.0	0.
238	CH+	+OH	-->CO+	+H2		.8D-09	.0	0.
239	CH+	+NH3	-->NH3+	+CH		.5D-09	.0	0.
240	CH+	+NH3	-->NH4+	+C		.4D-09	.0	0.
241	CH+	+H2O	-->HCO+	+H2		.3D-08	.0	0.
242	CH+	+H2O	-->H3O+	+C		.6D-09	.0	0.
243	CH+	+CO	-->HCO+	+C		.7D-11	.0	0.

244	CH+	+HCO	-->CH2+	+CO		.5D-09	.0	0.
245	CH+	+HCO	-->HCO+	+CH		.5D-09	.0	0.
246	CH+	+H2CO	-->CH3+	+CO		.1D-08	.0	0.
247	CH+	+H2CO	-->HCO+	+CH2		.1D-08	.0	0.
248	CH+	+O2	-->HCO+	+O		.1D-08	.0	0.
249	CH+	+O2	-->HCO	+O+		.1D-10	.0	0.
250	CH+	+O2	-->CO+	+OH		.1D-10	.0	0.
251	CH+	+H2S	-->HCS+	+H2		.1D-08	.0	0.
252	CH+	+CO2	-->HCO+	+CO		.2D-08	.0	0.
253	CH+	+OCS	-->HCS+	+CO		.1D-08	.0	0.
254	N+	+H-	-->H	+N		.4D-05	-.5	0.
255	N+	+H2	-->NH+	+H		.1D-08	.0	85.
256	N+	+C-	-->N	+C		.4D-05	-.5	0.
257	N+	+CH	-->CH+	+N		.4D-09	.0	0.
258	N+	+CH2	-->CH2+	+N		.1D-08	.0	0.
259	N+	+NH	-->NH+	+N		.4D-09	.0	0.
260	N+	+NH2	-->NH2+	+N		.1D-08	.0	0.
261	N+	+CH4	-->CH3+	+N	+H	.5D-09	.0	0.
262	N+	+CH4	-->CH4+	+N		.3D-10	.0	0.
263	N+	+CH4	-->HCN+	+H2	+H	.6D-10	.0	0.
264	N+	+OH	-->OH+	+N		.4D-09	.0	0.
265	N+	+NH3	-->NH2+	+NH		.2D-09	.0	0.
266	N+	+NH3	-->NH3+	+N		.2D-08	.0	0.
267	N+	+H2O	-->H2O+	+N		.3D-08	.0	0.
268	N+	+HCN	-->HCN+	+N		.1D-08	.0	0.
269	N+	+CO	-->CO+	+N		.8D-09	.0	0.
270	N+	+HCO	-->NH+	+CO		.5D-09	.0	0.
271	N+	+HCO	-->HCO+	+N		.5D-09	.0	0.
272	N+	+H2CO	-->HCO+	+NH		.7D-09	.0	0.
273	N+	+O2	-->O+	+NO		.4D-10	.0	0.
274	N+	+H2S	-->S+	+NH	+H	.2D-09	.0	0.
275	N+	+H2S	-->NH+	+HS		.6D-10	.0	0.
276	N+	+H2S	-->H2S+	+N		.1D-08	.0	0.
277	N+	+CO2	-->CO+	+NO		.2D-09	.0	0.
278	N+	+OCS	-->S+	+CO	+N	.3D-09	.0	0.
279	N+	+OCS	-->CS+	+NO		.7D-10	.0	0.
280	CH2+	+H	-->CH+	+H2		.1D-08	.0	7080.
281	CH2+	+N	-->HCN+	+H		.2D-09	.0	0.
282	CH2+	+O	-->HCO+	+H		.8D-09	.0	0.
283	CH2+	+S	-->HCS+	+H		.1D-08	.0	0.
284	CH2+	+H2	-->CH3+	+H		.2D-08	.0	0.
285	CH2+	+NH3	-->NH4+	+CH		.1D-08	.0	0.
286	CH2+	+HCO	-->CH3+	+CO		.5D-09	.0	0.
287	CH2+	+H2CO	-->HCO+	+CH3		.3D-08	.0	0.
288	CH2+	+O2	-->HCO+	+OH		.9D-09	.0	0.
289	CH2+	+H2S	-->HCS+	+H2	+H	.2D-09	.0	0.
290	CH2+	+OCS	-->HCS+	+HCO		.1D-08	.0	0.
291	NH+	+C	-->CH+	+N		.2D-08	.0	0.
292	NH+	+O	-->OH+	+N		.1D-08	.0	0.
293	NH+	+S	-->S+	+NH		.7D-09	.0	0.

294	NH+	+H2	-->NH2+	+H	.1D-08	.0	0.
295	NH+	+H2	-->H3+	+N	.2D-09	.0	0.
296	NH+	+CH	-->CH2+	+N	.1D-08	.0	0.
297	NH+	+CH2	-->CH3+	+N	.1D-08	.0	0.
298	NH+	+NH	-->NH2+	+N	.1D-08	.0	0.
299	NH+	+NH2	-->NH3+	+N	.2D-08	.0	0.
300	NH+	+OH	-->H2O+	+N	.1D-08	.0	0.
301	NH+	+NH3	-->NH3+	+NH	.2D-08	.0	0.
302	NH+	+NH3	-->NH4+	+N	.6D-09	.0	0.
303	NH+	+H2O	-->H3O+	+N	.1D-08	.0	0.
304	NH+	+H2O	-->H2O+	+NH	.1D-08	.0	0.
305	NH+	+H2O	-->NH2+	+OH	.9D-09	.0	0.
306	NH+	+H2O	-->NH3+	+O	.2D-09	.0	0.
307	NH+	+C2	-->HCN+	+C	.5D-09	.0	0.
308	NH+	+CN	-->HCN+	+N	.2D-08	.0	0.
309	NH+	+CO	-->HCO+	+N	.4D-09	.0	0.
310	NH+	+H2CO	-->HCO+	+NH2	.2D-08	.0	0.
311	CH3+	+H	-->CH2+	+H2	.7D-09	.0	10560.
312	CH3+	+O	-->HCO+	+H2	.4D-09	.0	0.
313	CH3+	+S	-->HCS+	+H2	.1D-08	.0	0.
314	CH3+	+NH3	-->NH4+	+CH2	.3D-09	.0	0.
315	CH3+	+HCO	-->CH4+	+CO	.4D-09	.0	0.
316	CH3+	+HCO	-->HCO+	+CH3	.4D-09	.0	0.
317	CH3+	+H2CO	-->HCO+	+CH4	.2D-08	.0	0.
318	O+	+H	-->H+	+O	.7D-09	.0	0.
319	O+	+H-	-->H	+O	.4D-05	-.5	0.
320	O+	+H2	-->OH+	+H	.2D-08	.0	0.
321	O+	+C-	-->O	+C	.4D-05	-.5	0.
322	O+	+CH	-->CH+	+O	.4D-09	.0	0.
323	O+	+CH	-->CO+	+H	.4D-09	.0	0.
324	O+	+CH2	-->CH2+	+O	.1D-08	.0	0.
325	O+	+NH	-->NH+	+O	.4D-09	.0	0.
326	O+	+NH2	-->NH2+	+O	.1D-08	.0	0.
327	O+	+CH4	-->CH3+	+OH	.1D-09	.0	0.
328	O+	+CH4	-->CH4+	+O	.9D-09	.0	0.
329	O+	+OH	-->OH+	+O	.4D-09	.0	0.
330	O+	+NH3	-->NH3+	+O	.1D-08	.0	0.
331	O+	+H2O	-->H2O+	+O	.3D-08	.0	0.
332	O+	+C2	-->CO+	+C	.5D-09	.0	0.
333	O+	+C2H	-->CO+	+CH	.5D-09	.0	0.
334	O+	+HCN	-->CO+	+NH	.1D-08	.0	0.
335	O+	+HCN	-->HCO+	+N	.1D-08	.0	0.
336	O+	+HCO	-->OH+	+CO	.4D-09	.0	0.
337	O+	+HCO	-->HCO+	+O	.4D-09	.0	0.
338	O+	+H2CO	-->HCO+	+OH	.1D-08	.0	0.
339	O+	+H2S	-->H2S+	+O	.1D-08	.0	0.
340	O+	+H2S	-->H2O	+S+	.2D-09	.0	0.
341	O+	+OCS	-->S+	+CO2	.2D-10	.0	0.
342	NH2+	+C	-->CH+	+NH	.1D-08	.0	0.
343	NH2+	+S	-->S+	+NH2	.4D-09	.0	0.

344	NH2+	+H2	-->NH3+	+H	.3D-09	.0	0.
345	NH2+	+CH	-->CH+	+NH2	.4D-09	.0	0.
346	NH2+	+CH	-->CH2+	+NH	.4D-09	.0	0.
347	NH2+	+CH2	-->CH2+	+NH2	.5D-09	.0	0.
348	NH2+	+CH2	-->CH3+	+NH	.5D-09	.0	0.
349	NH2+	+NH	-->NH3+	+N	.7D-09	.0	0.
350	NH2+	+NH2	-->NH3+	+NH	.1D-08	.0	0.
351	NH2+	+OH	-->H2O+	+NH	.7D-09	.0	0.
352	NH2+	+NH3	-->NH4+	+NH	.2D-08	.0	0.
353	NH2+	+NH3	-->NH3+	+NH2	.7D-09	.0	0.
354	NH2+	+H2O	-->NH3+	+OH	.1D-09	.0	0.
355	NH2+	+H2O	-->H3O+	+NH	.3D-08	.0	0.
356	NH2+	+H2O	-->NH4+	+O	.1D-09	.0	0.
357	NH2+	+HCO	-->HCO+	+NH2	.4D-09	.0	0.
358	NH2+	+H2CO	-->NH3+	+HCO	.6D-09	.0	0.
359	NH2+	+H2S	-->H2S+	+NH2	.7D-09	.0	0.
360	NH2+	+H2S	-->NH4+	+S	.2D-09	.0	0.
361	NH2+	+H2S	-->NH3+	+HS	.5D-09	.0	0.
362	CH4+	+H	-->CH3+	+H2	.1D-10	.0	0.
363	CH4+	+O	-->CH3+	+OH	.1D-08	.0	0.
364	CH4+	+H2	-->CH5+	+H	.3D-10	.0	0.
365	CH4+	+CH4	-->CH5+	+CH3	.2D-08	.0	0.
366	CH4+	+NH3	-->NH3+	+CH4	.2D-08	.0	0.
367	CH4+	+NH3	-->NH4+	+CH3	.1D-08	.0	0.
368	CH4+	+H2O	-->H3O+	+CH3	.3D-08	.0	0.
369	CH4+	+CO	-->HCO+	+CH3	.1D-08	.0	0.
370	CH4+	+H2S	-->H2S+	+CH4	.9D-09	.0	0.
371	OH+	+C	-->CH+	+O	.1D-08	.0	0.
372	OH+	+SI	-->SIH+	+O	.2D-08	.0	0.
373	OH+	+S	-->S+	+OH	.4D-09	.0	0.
374	OH+	+S	-->SO+	+H	.4D-09	.0	0.
375	OH+	+H2	-->H2O+	+H	.1D-08	.0	0.
376	OH+	+CH	-->CH+	+OH	.4D-09	.0	0.
377	OH+	+CH	-->CH2+	+O	.4D-09	.0	0.
378	OH+	+CH2	-->CH2+	+OH	.5D-09	.0	0.
379	OH+	+CH2	-->CH3+	+O	.5D-09	.0	0.
380	OH+	+NH	-->NH+	+OH	.4D-09	.0	0.
381	OH+	+NH	-->NH2+	+O	.4D-09	.0	0.
382	OH+	+NH2	-->NH3+	+O	.5D-09	.0	0.
383	OH+	+NH2	-->NH2+	+OH	.5D-09	.0	0.
384	OH+	+CH4	-->H3O+	+CH2	.1D-08	.0	0.
385	OH+	+CH4	-->CH5+	+O	.2D-09	.0	0.
386	OH+	+OH	-->H2O+	+O	.7D-09	.0	0.
387	OH+	+NH3	-->NH3+	+OH	.1D-08	.0	0.
388	OH+	+NH3	-->NH4+	+O	.1D-08	.0	0.
389	OH+	+H2O	-->H2O+	+OH	.2D-08	.0	0.
390	OH+	+H2O	-->H3O+	+O	.1D-08	.0	0.
391	OH+	+CN	-->HCN+	+O	.1D-08	.0	0.
392	OH+	+CO	-->HCO+	+O	.1D-08	.0	0.
393	OH+	+SIH	-->SIH2+	+O	.1D-08	.0	0.

394	OH+	+HCO	-->H2O+	+CO	.3D-09	.0	0.
395	OH+	+HCO	-->HCO+	+OH	.3D-09	.0	0.
396	OH+	+C2H6	-->H3O+	+C2H4	.2D-09	.0	0.
397	OH+	+H2S	-->H2S+	+OH	.1D-08	.0	0.
398	NH3+	+C	-->CH2+	+NH	.1D-10	.0	0.
399	NH3+	+SI	-->SI+	+NH3	.2D-08	.0	0.
400	NH3+	+H2	-->NH4+	+H	.2D-11	.0	0.
401	NH3+	+CH	-->NH4+	+C	.7D-09	.0	0.
402	NH3+	+CH2	-->CH3+	+NH2	.1D-08	.0	0.
403	NH3+	+NH	-->NH4+	+N	.7D-09	.0	0.
404	NH3+	+NH2	-->NH4+	+NH	.1D-10	.0	0.
405	NH3+	+CH4	-->NH4+	+CH3	.5D-09	.0	0.
406	NH3+	+OH	-->NH4+	+O	.7D-09	.0	0.
407	NH3+	+NH3	-->NH4+	+NH2	.2D-08	.0	0.
408	NH3+	+H2O	-->NH4+	+OH	.1D-09	.0	0.
409	NH3+	+HCO	-->NH4+	+CO	.4D-09	.0	0.
410	NH3+	+HCO	-->HCO+	+NH3	.4D-09	.0	0.
411	NH3+	+H2CO	-->NH4+	+HCO	.1D-08	.0	0.
412	NH3+	+H2S	-->NH4+	+HS	.1D-08	.0	0.
413	CH5+	+H	-->CH4+	+H2	.2D-10	.0	0.
414	CH5+	+C	-->CH+	+CH4	.1D-08	.0	0.
415	CH5+	+O	-->H3O+	+CH2	.2D-09	.0	0.
416	CH5+	+CH	-->CH2+	+CH4	.7D-09	.0	0.
417	CH5+	+CH2	-->CH3+	+CH4	.1D-08	.0	0.
418	CH5+	+NH	-->NH2+	+CH4	.7D-09	.0	0.
419	CH5+	+NH2	-->NH3+	+CH4	.1D-08	.0	0.
420	CH5+	+OH	-->H2O+	+CH4	.7D-09	.0	0.
421	CH5+	+NH3	-->NH4+	+CH4	.2D-08	.0	0.
422	CH5+	+H2O	-->H3O+	+CH4	.4D-08	.0	0.
423	CH5+	+CO	-->HCO+	+CH4	.1D-08	.0	0.
424	H2O+	+C	-->CH+	+OH	.1D-08	.0	0.
425	H2O+	+SI	-->SI+	+H2O	.3D-08	.0	0.
426	H2O+	+S	-->S+	+H2O	.4D-09	.0	0.
427	H2O+	+H2	-->H3O+	+H	.8D-09	.0	0.
428	H2O+	+CH	-->CH+	+H2O	.3D-09	.0	0.
429	H2O+	+CH	-->CH2+	+OH	.3D-09	.0	0.
430	H2O+	+CH2	-->CH3+	+OH	.5D-09	.0	0.
431	H2O+	+CH2	-->CH2+	+H2O	.5D-09	.0	0.
432	H2O+	+NH	-->H3O+	+N	.7D-09	.0	0.
433	H2O+	+NH2	-->NH3+	+OH	.5D-09	.0	0.
434	H2O+	+NH2	-->NH2+	+H2O	.5D-09	.0	0.
435	H2O+	+CH4	-->H3O+	+CH3	.1D-08	.0	0.
436	H2O+	+OH	-->H3O+	+O	.7D-09	.0	0.
437	H2O+	+NH3	-->NH3+	+H2O	.2D-08	.0	0.
438	H2O+	+NH3	-->NH4+	+OH	.9D-09	.0	0.
439	H2O+	+H2O	-->H3O+	+OH	.2D-08	.0	0.
440	H2O+	+CO	-->HCO+	+OH	.5D-09	.0	0.
441	H2O+	+HCO	-->H3O+	+CO	.3D-09	.0	0.
442	H2O+	+HCO	-->HCO+	+H2O	.3D-09	.0	0.
443	H2O+	+C2H6	-->H3O+	+C2H5	.2D-08	.0	0.

444	H2O+	+H2S	-->H2S+	+H2O		.1D-08	.0	0.
445	H2O+	+H2S	-->H3O+	+HS		.5D-10	.0	0.
446	NH4+	+H-	-->NH3	+H2		.4D-05	-.5	0.
447	H3O+	+C	-->HCO+	+H2		.1D-10	.0	0.
448	H3O+	+SI	-->SIH+	+H2O		.2D-08	.0	0.
449	H3O+	+H-	-->OH	+H2	+H	.4D-05	-.5	0.
450	H3O+	+H-	-->H2O	+H2		.4D-05	-.5	0.
451	H3O+	+CH	-->CH2+	+H2O		.7D-09	.0	0.
452	H3O+	+CH2	-->CH3+	+H2O		.9D-09	.0	0.
453	H3O+	+NH2	-->NH3+	+H2O		.1D-08	.0	0.
454	H3O+	+NH3	-->NH4+	+H2O		.2D-08	.0	0.
455	H3O+	+SIH	-->SIH2+	+H2O		.1D-08	.0	0.
456	H3O+	+CS	-->HCS+	+H2O		.1D-08	.0	0.
457	HCN+	+H	-->H+	+HCN		.4D-10	.0	0.
458	HCN+	+C	-->CH+	+CN		.1D-08	.0	0.
459	HCN+	+O	-->O+	+HCN		.6D-10	.0	0.
460	HCN+	+S	-->S+	+HCN		.6D-09	.0	0.
461	HCN+	+CH	-->CH2+	+CN		.6D-09	.0	0.
462	HCN+	+CH2	-->CH3+	+CN		.9D-09	.0	0.
463	HCN+	+NH	-->NH2+	+CN		.6D-09	.0	0.
464	HCN+	+NH2	-->NH3+	+CN		.9D-09	.0	0.
465	HCN+	+OH	-->H2O+	+CN		.6D-09	.0	0.
466	HCN+	+NH3	-->NH3+	+HCN		.2D-08	.0	0.
467	HCN+	+H2O	-->H3O+	+CN		.2D-08	.0	0.
468	HCN+	+H2O	-->H2O+	+HCN		.2D-08	.0	0.
469	HCN+	+CO	-->HCO+	+CN		.1D-09	.0	0.
470	SI+	+H-	-->SI	+H		.4D-05	-.5	0.
471	SI+	+C-	-->SI	+C		.4D-05	-.5	0.
472	SI+	+CH	-->SIC+	+H		.6D-09	.0	0.
473	SI+	+OH	-->SIO+	+H		.6D-09	.0	0.
474	SI+	+O2	-->SIO+	+O		.1D-12	.0	0.
475	CO+	+H	-->H+	+CO		.8D-09	.0	0.
476	CO+	+C	-->C+	+CO		.1D-09	.0	0.
477	CO+	+O	-->O+	+CO		.1D-09	.0	0.
478	CO+	+S	-->S+	+CO		.1D-08	.0	0.
479	CO+	+H2	-->HCO+	+H		.2D-08	.0	0.
480	CO+	+CH	-->CH+	+CO		.3D-09	.0	0.
481	CO+	+CH	-->HCO+	+C		.3D-09	.0	0.
482	CO+	+CH2	-->CH2+	+CO		.4D-09	.0	0.
483	CO+	+CH2	-->HCO+	+CH		.4D-09	.0	0.
484	CO+	+NH	-->NH+	+CO		.3D-09	.0	0.
485	CO+	+NH	-->HCO+	+N		.3D-09	.0	0.
486	CO+	+NH2	-->HCO+	+NH		.5D-09	.0	0.
487	CO+	+NH2	-->NH2+	+CO		.5D-09	.0	0.
488	CO+	+CH4	-->CH4+	+CO		.8D-09	.0	0.
489	CO+	+CH4	-->HCO+	+CH3		.5D-09	.0	0.
490	CO+	+OH	-->OH+	+CO		.3D-09	.0	0.
491	CO+	+OH	-->HCO+	+O		.3D-09	.0	0.
492	CO+	+NH3	-->HCO+	+NH2		.4D-10	.0	0.
493	CO+	+NH3	-->NH3+	+CO		.2D-08	.0	0.

494	CO+	+H2O	-->H2O+	+CO		.2D-08	.0	0.
495	CO+	+H2O	-->HCO+	+OH		.9D-09	.0	0.
496	CO+	+C2H	-->HCO+	+C2		.4D-09	.0	0.
497	CO+	+HCN	-->HCN+	+CO		.3D-08	.0	0.
498	CO+	+HCO	-->HCO+	+CO		.7D-09	.0	0.
499	CO+	+H2CO	-->HCO+	+HCO		.2D-08	.0	0.
500	CO+	+H2S	-->H2S+	+CO		.2D-08	.0	0.
501	CO+	+H2S	-->HCO+	+HS		.2D-09	.0	0.
502	CO+	+SO2	-->SO+	+CO2		.2D-08	.0	0.
503	SIH+	+H	-->SI+	+H2		.2D-08	.0	0.
504	SIH+	+C	-->SIC+	+H		.2D-09	.0	0.
505	SIH+	+O	-->SIO+	+H		.4D-09	.0	0.
506	SIH+	+CH	-->CH2+	+SI		.6D-09	.0	0.
507	SIH+	+NH3	-->NH4+	+SI		.1D-08	.0	0.
508	SIH+	+H2O	-->H3O+	+SI		.8D-09	.0	0.
509	HCO+	+C	-->CH+	+CO		.1D-08	.0	0.
510	HCO+	+SI	-->SIH+	+CO		.2D-08	.0	0.
511	HCO+	+H-	-->CO	+H2		.4D-05	-.5	0.
512	HCO+	+CH	-->CH2+	+CO		.6D-09	.0	0.
513	HCO+	+CH2	-->CH3+	+CO		.9D-09	.0	0.
514	HCO+	+NH	-->NH2+	+CO		.6D-09	.0	0.
515	HCO+	+NH2	-->NH3+	+CO		.9D-09	.0	0.
516	HCO+	+OH	-->H2O+	+CO		.6D-09	.0	0.
517	HCO+	+NH3	-->NH4+	+CO		.2D-08	.0	0.
518	HCO+	+H2O	-->H3O+	+CO		.2D-08	.0	0.
519	HCO+	+SIH	-->SIH2+	+CO		.9D-09	.0	0.
520	HCO+	+HS	-->H2S+	+CO		.8D-09	.0	0.
521	HCO+	+CS	-->HCS+	+CO		.1D-08	.0	0.
522	S+	+SI	-->SI+	+S		.2D-08	.0	0.
523	S+	+H-	-->S	+H		.4D-05	-.5	0.
524	S+	+C-	-->S	+C		.4D-05	-.5	0.
525	S+	+CH	-->CS+	+H		.6D-09	.0	0.
526	S+	+CH2	-->HCS+	+H		.1D-10	.0	0.
527	S+	+CH4	-->HCS+	+H2	+H	.2D-10	.0	0.
528	S+	+OH	-->SO+	+H		.6D-09	.0	0.
529	S+	+NH3	-->NH3+	+S		.1D-08	.0	0.
530	S+	+C2	-->CS+	+C		.8D-09	.0	0.
531	S+	+SIH	-->SIH+	+S		.4D-09	.0	0.
532	S+	+HCO	-->HCO+	+S		.4D-09	.0	0.
533	S+	+H2CO	-->H2S+	+CO		.3D-09	.0	0.
534	S+	+H2CO	-->HCO+	+HS		.3D-09	.0	0.
535	S+	+O2	-->SO+	+O		.1D-10	.0	0.
536	S+	+H2S	-->H2S+	+S		.4D-10	.0	0.
537	S+	+SIC	-->SIC+	+S		.4D-08	.0	0.
538	H2S+	+C	-->HCS+	+H		.1D-08	.0	0.
539	H2S+	+O	-->SO+	+H2		.3D-09	.0	0.
540	H2S+	+SI	-->SI+	+H2S		.2D-08	.0	0.
541	H2S+	+S	-->S+	+H2S		.1D-08	.0	0.
542	H2S+	+NH3	-->NH4+	+HS		.1D-08	.0	0.
543	H2S+	+NH3	-->NH3+	+H2S		.3D-09	.0	0.

544	H2S+	+H2O	-->H3O+	+HS		.8D-09	.0	0.
545	H2S+	+HCO	-->HCO+	+H2S		.7D-09	.0	0.
546	SIC+	+N	-->SI+	+CN		.8D-09	.0	0.
547	SIC+	+O	-->SIO+	+C		.6D-09	.0	0.
548	SIO+	+C	-->SI+	+CO		.1D-08	.0	0.
549	SIO+	+N	-->SI+	+NO		.2D-09	.0	0.
550	SIO+	+O	-->SI+	+O2		.2D-09	.0	0.
551	SIO+	+S	-->SI+	+SO		.1D-08	.0	0.
552	SIO+	+CH	-->HCO+	+SI		.6D-09	.0	0.
553	SIO+	+CH2	-->SI+	+H2CO		.8D-09	.0	0.
554	SIO+	+C2	-->SIC+	+CO		.8D-09	.0	0.
555	SIO+	+CO	-->SI+	+CO2		.8D-09	.0	0.
556	SIO+	+HCO	-->HCO+	+SIO		.7D-09	.0	0.
557	CS+	+C	-->C+	+CS		.2D-08	.0	0.
558	CS+	+O	-->CO+	+S		.6D-10	.0	0.
559	CS+	+SI	-->SI+	+CS		.1D-09	.0	0.
560	CS+	+H2	-->HCS+	+H		.5D-09	.0	0.
561	CS+	+CH4	-->HCS+	+CH3		.5D-09	.0	0.
562	HCS+	+O	-->HCO+	+S		.5D-11	.0	0.
563	HCS+	+NH3	-->NH4+	+CS		.2D-08	.0	0.
564	SO+	+NH3	-->NH3+	+SO		.1D-08	.0	0.
565	H2+	+ELECTR	-->H	+H		.2D-06	-.4	0.
566	H3+	+ELECTR	-->H2	+H		.3D-06	-.5	0.
567	H3+	+ELECTR	-->H	+H	+H	.3D-06	-.5	0.
568	CH+	+ELECTR	-->C	+H		.2D-05	-.4	0.
569	CH2+	+ELECTR	-->C	+H2		.2D-05	-.5	0.
570	CH2+	+ELECTR	-->CH	+H		.2D-05	-.5	0.
571	NH+	+ELECTR	-->N	+H		.7D-06	-.5	0.
572	CH3+	+ELECTR	-->CH2	+H		.1D-05	-.5	0.
573	CH3+	+ELECTR	-->CH	+H2		.3D-05	-.5	0.
574	CH3+	+ELECTR	-->CH	+H	+H	.1D-05	-.5	0.
575	NH2+	+ELECTR	-->N	+H	+H	.3D-05	-.5	0.
576	NH2+	+ELECTR	-->NH	+H		.3D-05	-.5	0.
577	CH4+	+ELECTR	-->CH3	+H		.3D-05	-.5	0.
578	CH4+	+ELECTR	-->CH2	+H	+H	.3D-05	-.5	0.
579	OH+	+ELECTR	-->O	+H		.6D-06	-.5	0.
580	NH3+	+ELECTR	-->NH2	+H		.3D-05	-.5	0.
581	NH3+	+ELECTR	-->NH	+H	+H	.3D-05	-.5	0.
582	CH5+	+ELECTR	-->CH4	+H		.3D-05	-.3	0.
583	CH5+	+ELECTR	-->CH3	+H2		.3D-05	-.3	0.
584	H2O+	+ELECTR	-->OH	+H		.3D-05	-.5	0.
585	H2O+	+ELECTR	-->O	+H2		.3D-05	-.5	0.
586	NH4+	+ELECTR	-->NH3	+H		.2D-04	-.6	0.
587	NH4+	+ELECTR	-->NH2	+H	+H	.2D-04	-.6	0.
588	H3O+	+ELECTR	-->H2O	+H		.6D-05	-.5	0.
589	H3O+	+ELECTR	-->OH	+H	+H	.1D-04	-.5	0.
590	HCN+	+ELECTR	-->CN	+H		.3D-05	-.5	0.
591	CO+	+ELECTR	-->O	+C		.1D-05	-.5	0.
592	SIH+	+ELECTR	-->SI	+H		.3D-05	-.5	0.
593	HCO+	+ELECTR	-->CO	+H		.3D-04	-1.0	0.

594	SIH2+	+ELECTR	-->SI	+H	+H	.3D-05	-.5	0.
595	SIH2+	+ELECTR	-->SIH	+H		.3D-05	-.5	0.
596	SIH2+	+ELECTR	-->SI	+H2		.3D-05	-.5	0.
597	H2S+	+ELECTR	-->S	+H	+H	.3D-05	-.5	0.
598	H2S+	+ELECTR	-->HS	+H		.3D-05	-.5	0.
599	SIC+	+ELECTR	-->SI	+C		.3D-05	-.5	0.
600	SIO+	+ELECTR	-->SI	+O		.3D-05	-.5	0.
601	CS+	+ELECTR	-->C	+S		.3D-05	-.5	0.
602	HCS+	+ELECTR	-->CS	+H		.4D-05	-.8	0.
603	SO+	+ELECTR	-->S	+O		.3D-05	-.5	0.
604	H	+CRP	-->H+	+ELECTR		.6D-17	.0	0.
605	HE	+CRP	-->HE+	+ELECTR		.7D-17	.0	0.
606	C	+CRP	-->C+	+ELECTR		.2D-16	.0	0.
607	N	+CRP	-->N+	+ELECTR		.3D-16	.0	0.
608	O	+CRP	-->O+	+ELECTR		.3D-16	.0	0.
609	H2	+CRP	-->H+	+ELECTR	+H	.2D-18	.0	0.
610	H2	+CRP	-->H2+	+ELECTR		.1D-16	.0	0.
611	H2	+CRP	-->H	+H		.1D-17	.0	0.
612	H2	+CRP	-->H+	+H-		.4D-20	.0	0.
613	CO	+CRP	-->CO+	+ELECTR		.4D-16	.0	0.

Ionisation durch radioaktive Kerne:

614	H2		-->H2+	+ELECTR		.61D-17	.0	0.
615	HE		-->HE+	+ELECTR		.52D-17	.0	0.

Anhang B: Stationäre Keplerscheiben

· **Kontinuitätsgleichung:**

$$2\pi s \Sigma v_s = \dot{M} \tag{1}$$

· **Drehimpulserhaltung:**

$$\nu \Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi} \tag{2}$$

· **Hydrostatisches Gleichgewicht in vertikaler Richtung:**

$$H = \frac{c_s}{\Omega} \tag{3}$$

· **Energiegleichung:**

$$\frac{4\sigma}{3\tau} {T_c}^4 = \frac{3GM\dot{M}}{8\pi s^3} \tag{4}$$

· **Zustandsgleichung:**

$$P = \frac{\Sigma \mathcal{R} T_c}{2H\mu} \tag{5}$$

· **Schallgeschwindigkeit:**

$$c_s = \sqrt{\frac{P}{\rho}} = \sqrt{\frac{\mathcal{R} T_c}{\mu}} \tag{6}$$

· **Viskosität:**

$$\nu = \alpha c_s H \tag{7}$$

· **Optische Tiefe:**

$$\tau = \frac{1}{2} \Sigma \kappa_R \tag{8}$$

· **Winkelgeschwindigkeit:**

$$\Omega = \sqrt{\frac{GM}{s^3}} \tag{9}$$

6 und 9 in 3:

$$\frac{H}{\sqrt{T}} = \sqrt{\frac{\mathcal{R}}{G}} \sqrt{\frac{1}{M\mu}} \sqrt{s^3} \tag{10}$$

8 in 4:

$$\frac{T^4}{\Sigma} = \frac{9}{32\pi} \frac{G}{\sigma} M\dot{M} \frac{1}{s^3} \kappa_R \tag{11}$$

6 in 7:

$$\nu = \alpha \sqrt{\frac{\mathcal{R}}{\mu}} \sqrt{T} H \tag{12}$$

10 in 12:

$$\frac{\nu}{T} = \alpha \frac{\mathcal{R}}{\sqrt{G}} \frac{1}{\sqrt{M\nu}} \sqrt{s^3} \tag{13}$$

13 in 2:

$$T\Sigma = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{3\pi} \frac{\sqrt{G}}{\mathcal{R}} \sqrt{M} \dot{M} \mu \frac{1}{s^3} \tag{14}$$

Zusammenstellung:

$$A_1 = \frac{1}{\alpha}\frac{1}{3\pi}\frac{\sqrt{G}}{\mathcal{R}}\sqrt{M}\dot{M}\mu \Longrightarrow T\Sigma = A_1\frac{1}{\sqrt{s^3}} \tag{15}$$

$$A_2 = \sqrt{\frac{\mathcal{R}}{G}}\sqrt{\frac{1}{M\mu}} \Longrightarrow \frac{H}{\sqrt{T}} = A_2\sqrt{s^3} \tag{16}$$

$$A_3 = \frac{9}{32\pi}\frac{G}{\sigma}M\dot{M} \Longrightarrow \frac{T^4}{\Sigma} = A_3\kappa_R\frac{1}{\sqrt{s^3}} \tag{17}$$

15 in 16:

$$H\Sigma^{\frac{1}{2}} = A_1^{\frac{1}{2}}A_2 s^{\frac{3}{4}} \tag{18}$$

15 in 17:

$$\Sigma = A_1^{\frac{4}{5}}A_3^{-\frac{1}{5}}\kappa_R{}^{-\frac{1}{5}}s^{-\frac{3}{5}} \tag{19}$$

19 in 15:

$$T = A_1^{\frac{1}{5}}A_3^{\frac{1}{5}}\kappa_R{}^{\frac{1}{5}}s^{-\frac{9}{10}} \tag{20}$$

19 in 18:

$$H = A_1^{\frac{1}{10}}A_2A_3^{\frac{1}{10}}\kappa_R{}^{\frac{1}{10}}s^{\frac{21}{20}} \tag{21}$$

19, 20 und 21 in 5:

$$P = \frac{\mathcal{R}}{2\mu}A_1^{\frac{9}{10}}A_2^{-1}A_3^{-\frac{1}{10}}\kappa_R{}^{-\frac{1}{10}}s^{-\frac{51}{20}} \tag{22}$$

Der radiale Abstand s ist in AE und die Zentralmasse in $M_\odot$ ausgedrückt. $\dot{M}_{-7}$ ist die Akkretionsrate in Einheiten von $10^{-7}M_\odot$/Jahr. Wir erhalten:

$$T_c = 229\, s^{-\frac{9}{10}}\left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{\frac{1}{5}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{3}{10}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{2}{5}}\kappa_R{}^{\frac{1}{5}} \quad [\mathrm{K}]$$

$$P = 0.095\, s^{-\frac{51}{20}}\frac{1}{\alpha}\left(\frac{1}{\alpha\mu^4}\right)^{-\frac{1}{10}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{17}{20}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{4}{5}}\kappa_R{}^{-\frac{1}{10}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm\,s^2}}\right]$$

$$H = 6.939\cdot 10^{11}s^{\frac{21}{20}}\left(\frac{1}{\alpha\mu^4}\right)^{\frac{1}{10}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{7}{20}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{5}}\kappa_R{}^{\frac{1}{10}} \quad [\mathrm{cm}]$$

$$\Sigma = 7.004\, s^{-\frac{3}{5}}\left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{\frac{4}{5}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{5}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{3}{5}}\kappa_R{}^{-\frac{1}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm^2}}\right]$$

$$v_s = 9633\, s^{-\frac{2}{5}}\left(\frac{\mu}{\alpha}\right)^{-\frac{4}{5}}\left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{1}{5}}(\dot{M}_{-7})^{\frac{2}{5}}\kappa_R{}^{\frac{1}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right]$$

Mit der Annahme

$$\Sigma(s = 1\ \mathrm{AE}) = 2500 \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^2}\right]$$

vereinfachen sich die Gleichungen. Wir erhalten

$$\frac{\alpha}{\mu} = 6.451 \cdot 10^{-4} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{4}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{3}{4}} \kappa_R^{-\frac{1}{4}}$$

und dann

$$\Sigma = 2500\, s^{-\frac{3}{5}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm}^2}\right]$$

$$T_c = 997\, s^{-\frac{9}{10}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{1}{4}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{4}} \kappa_R^{\frac{1}{4}} \quad [\mathrm{K}]$$

$$P = 71.65\, s^{-\frac{51}{20}} \left(\frac{1}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{\frac{5}{8}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{8}} \kappa_R^{\frac{1}{8}} \quad \left[\frac{\mathrm{g}}{\mathrm{cm\, s}^2}\right]$$

$$H = 1.446 \cdot 10^{12} s^{\frac{21}{20}} \left(\frac{1}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M}{M_\odot}\right)^{-\frac{3}{8}} (\dot{M}_{-7})^{\frac{1}{8}} \kappa_R^{\frac{1}{8}} \quad [\mathrm{cm}]$$

$$v_s = 26.94\, s^{-\frac{2}{5}} \dot{M}_{-7} \quad \left[\frac{\mathrm{cm}}{\mathrm{s}}\right]$$

$$\nu = 2.687 \cdot 10^{14} s^{\frac{3}{5}} \dot{M}_{-7} \quad \left[\frac{\mathrm{cm}^2}{\mathrm{s}}\right]$$

Literatur

[Aitken *et al.* 1988] AITKEN D.K., ROCHE P.F., SMITH C.H., JAMES S.D., HOUGH J.H. *Infrared spectropolarimetry of AFGL 2591: evidence for an annealed grain component* Month. Not. R. astr. Soc., **230**, 629–638 (1988)

[Alexander & Ferguson 1994] ALEXANDER D.R., FERGUSON J.W. *Low temperature Rosseland opacities* Astroph. J., **437**, 879–891 (1994)

[Anders & Grevesse 1989] ANDERS E., GREVESSE N. *Abundances of the elements: meteoritic and solar* Geochim. Cosmochim. Acta, **53**, 197–214 (1989)

[Bauer *et al.* 1996] BAUER I., FINOCCHI F., DUSCHL W.J., GAIL H.–P., SCHLÖDER J.P. *Simulation of chemical reactions and dust destruction in protoplanetary accretion disks* Astron. Astrophys., (1996) im Druck

[Baulch *et al.* 1992] BAULCH D.L., COBOS C.J., COX R.A., ESSER C., FRANCK P., JUST TH., KER J.A., PILLING M.J., TROE J., WALKER R.W., WARNATZ J. *Evaluated kinetic datas for combustion modelling* J. Phys. Chem. Ref. Data, **21**, 411 (1992)

[Beck 1993] BECK H. *Ionisation, chemistry and dust formation in the outflows of Classical Novæ and Red Giants* Doktorarbeit, Technische Universität Berlin (1993)

[Beckwith *et al.* 1990] BECKWITH S.V.W., SARGENT A.I., CHINI R.S., GÜSTEN R. *A survey for circumstellar disks around young stellar objects* Astron. J., **99**, 924–945 (1990)

[Bernatowicz *et al.* 1991] BERNATOWICZ T.J., AMARI S., ZINNER E.K., LEWIS R.S. *Interstellar grains within interstellar grains* Astroph. J., **373**, L73–L76 (1991)

[Bertout *et al.* 1988] BERTOUT C., BASRI G., BOUVIER J. *Accretion disks around T Tauri stars* Astroph. J., **330**, 350–373 (1988)

[Britten *et al.* 1990] BRITTEN J.A., TONG J., WESTBROOK C.K. *A numerical study of silane combustion* Twenty–Third Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 195–202 (1990)

[Cameron 1973] CAMERON A.G.W. *Abundances of the elements in the solar system* Space Sci. Rev., **15**, 122–146 (1973)

[Cohen *et al.* 1989] COHEN M., TIELENS A.G.G.M., BREGMAN J.D. *Mid–infrared spectra of WC 9 stars: the composition of circumstellar and interstellar dust* Astroph. J., **344**, L13–L16 (1989)

[Colangeli *et al.* 1995] COLANGELI L., MENNELLA V., PALUMBO P., ROTUNDI A., BUSSOLETTI E. *Mass extinction coefficients of various submicron amorphous carbon grains: tabulated values from 40 nm to 2 mm* Astron. Astrophys., (1995) im Druck

[van Dishoeck *et al.* 1993] VAN DISHOECK E., BLAKE G.A., DRAINE B.T., LUNINE J.I. *The chemical evolution of protostellar and protoplanetary matter* in Protostars and Planets III, E.H. Levi und J.I. Lunine Eds., The University of Arizona Press, 186–244 (1993)

[Dolginov & Stepinski 1994] DOLGINOV A.Z., STEPINSKI T.F. *Are cosmic rays effective for ionization of protoplanetary accretion disks ?* Astroph. J., **427**, 377–383 (1994)

[Dorschner 1993] DORSCHNER J. *Interstellar dust – subject and agent of the galactic evolution* in Review in Modern Astronomy 6, Astronomische Gesellschaft, 117–147 (1993)

[Dorschner & Henning 1995] DORSCHNER J., HENNING TH. *Dust metamorphosis in the Galaxy* Astron. Astrophys. Rev., **6**, 271–233 (1996)

[Draine 1985] DRAINE B.T. *Tabulated properties of graphite and silicate grains* Astroph. J. Supp. Series, **57**, 587–594 (1985)

[Duschl & Tscharnuter 1991] DUSCHL W.J., TSCHARNUTER W.M. *On the inner boundary condition of thin Keplerian accretion disks* Astron. Astrophys., **241**, 153–158 (1991)

[Duschl *et al.* 1995] DUSCHL W.J., GAIL H.-P., TSCHARNUTER W.M. *Destruction processes for dust in protoplanetary accretion disks* Astron. Astrophys., (1996) im Druck

[El–Gamal 1995] EL–GAMAL M. *Simulation der Rußbildung in vorgemischten Verbrennungssystemen* Doktorarbeit, Universität Stuttgart (1995)

[Frank *et al.* 1992] FRANK J., KING A., RAINE D. *Accretion power in astrophysics* Cambridge University Press (1992)

[Von Gersum & Roth 1992] VON GERSUM S., ROTH P. *Soot Oxidation in High Temperature* N_2O/Ar *and* NO/Ar *Mixtures* Twenty–Fourth Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 999–1006 (1992)

[Greenberg & Li 1996] GREENBERG J.M., LI A. *What are the true astronomical silicates?* Astron. Astrophys., (1996) im Druck

[Irvine *et al.* 1991] IRVINE W.M., OHISHI M., KAIFU N. *Chemical abundances in cold, dark interstellar clouds* Icarus, **91**, 2–6 (1991)

[Kahaner *et al.* 1989] KAHANER D., MOLER C., NASH S. *Numerical methods and software* Prentice–Hall (1989)

[Kwok & Chan 1993] KWOK S., CHAN J.S. *Carbon stars with circumstellar silicate features* Astron. Journal, **106**, 2140–2153 (1993)

[Landau & Lifshitz 1960] LANDAU L.D., LIFSHITZ E.M. *Electrodynamics of continuous media* Pergamon Press (1960)

[Landolt–Börnstein 1968] LANDOLT–BÖRNSTEIN *Zahlenwerte und Funktionen* **Vol. 5b**, K. Schäfer Ed., Springer Verlag, Heidelberg (1968)

[Léger & Puget 1984] LEGER A., PUGET J.L. *Identification of the unidentified IR emission features of interstellar dust?* Astron. Astrophys., **137**, L5–L8 (1984)

[Léger *et al.* 1985] LEGER A., JURA M., OMONT A. *Desorption from interstellar grains* Astron. Astrophys., **144**, 147–160 (1985)

[Lissauer 1993] LISSAUER J.J. *Planet formation* Ann. Rev. Astron. Astrophys., **31**, 129–174 (1993)

[Mathis *et al.* 1977] MATHIS J.S., RUMPL W., NORDSIECK H.N. *The size distribution of interstellar grains* Astroph. J., **217**, 425–433 (1977)

[Millar *et al.* 1991] MILLAR T.J., RAWLINGS J.M.C., BENNETT A., BROWN P.D., CHARNLEY S.B. *Gas phase reactions and rate coefficients for use in Astrochemistry. The UMIST ratefile* Astron. Astrophys. Supp. Series, **87**, 585–619 (1991)

[Mitchell 1984] MITCHELL G.F. *Effects of shocks on the molecular composition of a dense interstellar cloud* Astroph. J. Supp. Series, **54**, 81–101 (1984)

[Neufeld & Hollenbach 1994] NEUFELD A.N., HOLLENBACH D.J. *Dense molecular shocks and accretion onto protostellar disks* Astroph. J., **428**, 170–185 (1994)

[Nuth & Donn 1982] NUTH J.A., DONN B. *Laboratory measurements of amorphous silicate smokes and the infrared spectra of oxygen–rich stars* Astroph. J., **257**, L103–L105 (1982)

[Ossenkopf 1993] OSSENKOPF V. *Dust coagulation in dense molecular clouds* Astron. Astrophys., **280**, 617–646 (1993)

[Paresce 1991] PARESCE F. *On the evolutionary status of β Pictoris* Astron. Astrophys., **247**, L25–L27 (1991)

[Pollack *et al.* 1994] POLLACK J.B., HOLLENBACH D., BECKWITH S., SIMONELLI D.P., ROUSH T., FONG W. *Composition and radiative properties of grains in molecular clouds and accretion disks* Astroph. J., **421**, 615–639 (1994)

[Pringle 1981] PRINGLE J.E. *Accretion disks in astrophysics* Ann. Rev. Astron. Astrophys., **19**, 137–162 (1981)

[Pruppacher & Klett 1978] PRUPPACHER H.R., KLETT J.D. *Microphysics of clouds and precipitations* Reidel, Dordrecht (1978)

[Sandford & Allamandola 1988] SANDFORD S.A., ALLAMANDOLA L.J. *The condensation and vaporization behavior of* H_2O:CO *ices implications for interstellar grains and cometary activity* Icarus, **76**, 201–224 (1988)

[Sargent & Beckwith 1987] SARGENT A.I., BECKWITH S.V.W. *Kinematics of the circumstellar gas of HL Tauri and R Monocerotis* Astroph. J., **323**, 294–305 (1987)

[Sargent *et al.* 1988] SARGENT A.I., BECKWITH S.V.W., KEENE J., MASSON C. *Small-scale structure of the circumstellar gas around L1551 IRS 5* Astroph. J., **333**, 936–942 (1988)

[Shakura & Sunyaev 1973] SHAKURA N.I., SUNYAEV R.A. *Black holes in binary systems. Observational appearance* Astron. Astrophys., **24**, 337–355 (1973)

[Sharp & Huebner 1990] SHARP C.M., HUEBNER W.M. *Molecular equilibrium with condensation* Astroph. J. Supp. Series, **72**, 417–431 (1990)

[Skinner *et al.* 1990] SKINNER C.J., GRIFFIN I., WHITMORE B. *Red giants with unusual dust shells – I. The database* Month. Not. R. Astr. Soc., **259**, 78–86 (1990)

[Smith & Terrile 1984] SMITH B.A., TERRILE R.J. *A Circumstellar Disk Around β Pictoris* Science, **226**, 1421–1424 (1984)

[Umebayashi & Nakano 1981] UMEBAYASHI T., NAKANO T. *Fluxes of Energetic Particles and the Ionization Rate in Very Dense Interstellar Clouds* Publ. Astron. Soc. Japan, **33**, 617–635 (1981)

[Wagenblast 1992] WAGENBLAST R. *Interpretation of the level population distribution of highly rotationally excited* H_2 *molecules in diffuse clouds* Month. Not. R. Astr. Soc., **259**, 155–165 (1992)

[Warnatz 1996] WARNATZ J. private Mitteilung

[Wasserburg 1985] WASSERBURG G.J. *Short-lived nuclei in the early solar system* in Protostars and Planets II, Edited by D.C. Black and M.S. Matthews, The University of Arizona Press, 703–737 (1985)

[Watson 1975] WATSON W.D. *Formation and destruction of interstellar molecules* in Atomic and Molecular Physics and the Interstellar Matter, Balian *et al.*, 181–321 (1975)

[Woolf & Ney 1969] WOOLF N.J., NEY E.P. *Circumstellar infrared emission from cool stars* Astroph. J., **155**, L181–L187 (1969)

Danksagung

Endlich ist es soweit. Einfach war die ganze Arbeit bestimmt nicht. Aber ich habe Hilfe und Unterstützung von hervorragenden Leuten bekommen. Bei wem man sich zuerst bedanken muß, ist immer ein schwieriges Problem. Nach langer Überlegung habe ich festgestellt, daß ohne meine Eltern und meine Oma nichts gelaufen wäre. Sie wissen alle, was ich meine. Bei meinem Bruder und meiner Schwester möchte ich mich auch bedanken.

Bei meinem Doktorvater, dem Herrn Priv.–Doz. Dr. H.–P. Gail, möchte ich mich ganz herzlich bedanken: für die Vergabe dieses großartigen Themas, für seine Hilfsbereitschaft und besonders für das genaue Durchlesen meiner Arbeit.

Eine entscheidende Rolle hat auch Herrn Prof. Dr. Werner M. Tscharnuter gespielt. Er hat mir sein Vertrauen geschenkt und ich danke ihm ganz herzlich für seine Hilfe bezüglich des Wehrdienstes.

Priv.–Doz. Dr. Wolfgang J. Duschl hat mir auch sehr viel geholfen, allerdings nicht nur in Sachen Astrophysik, denn dank seiner Geduld konnte ich auch viele bürokratische Probleme überwinden.

Ein Dankeschön haben auch Herrn Prof. Dr. H.G. Bock, Herrn Dr. J.P. Schlöder und ganz besonders Frau Irene Bauer verdient. Ohne ihre perfekt funktionierende Routine DAESOL und ihre technische Unterstützung wäre diese Arbeit vielleicht gar nicht zustande gekommen.

Des weiteren danke ich Herrn Prof. Dr. B. Wolf, der in letzter Minute die Erstellung des Zweitgutachtens übernommen hat.

Dem Herrn Prof. Dr. J. Warnatz gilt ein besonderer Dank für seine Beratung bezüglich der Kohlenstoffoxidation.

Alle Mitglieder des Instituts und besonders die aktiven Mitglieder des täglichen Kaffeetrinkens möchte ich ebenfalls für die angenehme Arbeitsatmosphäre einschließen.

Frédéric Finocchi, Mai 1996.

..... STOP ! j'avais presque oublié de remercier Gela ! Je tiens donc à remercier l'une des meilleures musicothérapeutes qui soit. Pour les séances de monocorde, de djembé, d'accordéon, de hip hop, de boogie woogie,.... enfin pour tout quoi !