Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit
im Studiengang Physik
vorgelegt von

Michael Mayer
aus
Schwäbisch Gmünd

2002

Zur Modellierung von Population III - Akkretionsscheiben

- Erste Ansätze und Ergebnisse -

Die Diplomarbeit wurde von Michael Mayer ausgeführt am
Institut für theoretische Astrophysik
unter der Betreuung von
Herrn Prof. Dr. W.J. Duschl

In dieser Diplomarbeit werden erste Ansätze für primordiale Akkretionsscheiben vorgestellt. Der Berechnung der wichtigen Materialfunktion, der Opazität für primordiale Materie, ist ein Großteil dieser Arbeit gewidmet, da insbesondere im unteren Temperaturbereich keine Opazitäten für primordiale Mischungen existieren. Der Einfluß von Lithium auf die Opazität wird untersucht. Mit Hilfe der so gewonnenen Opazität werden erste, nicht-selbstgravitierende, stationäre Keplerscheiben mit β-Viskosität gerechnet.

Es stellt sich heraus, daß Lithium einen merklichen Einfluß als indirekter Absorber auf die Opazität hat. Die Scheiben sind allesamt optisch dünn, was auf das Fehlen der schwereren Elemente zurückzuführen ist.

Mit den Ergebnissen dieser Arbeit ist man nun in der Lage, grundlegende Scheibenparameter zu verstehen und mit Hilfe der Opazität realistischere Modellierungen durchzuführen, nicht nur in der Scheibenphysik.

This diploma thesis presents first approaches for understanding primordial accretion discs. A main part of this work deals with the calculation of the opacity of primordial matter, which is very important for astrophysics with primordial matter. The calaculation of opacity is due to the lack of opacity calculations in the low-temperature range. The influence of lithium on the opacity is examined. First very basic models are presented with the aid of these opacities. The disc models are non-selfgravitating Kepler discs with β-viscosity.

The main results of this work are the big impact of lithium as an indirect absorber on the opacities. The discs are all optically thin which is due to the lack of dust in primordial matter.

The results of this thesis give a first impression of basic parameters of primordial accretion discs. These results combined with the calculated opacity help us to do better modelling of primordial discs and other primordial astrophysics.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Unser heutiges Weltall wird dominiert von leuchtenden Objekten, den Sternen. In einer klaren Nacht kann man unter guten Bedingungen mit dem bloßen Auge ca. 1000 Sterne sehen, die vor dem matt schimmernden Band der Milchstraße stehen. Unter wirklich dunklem Himmel kann man entfernte Galaxien sehen, die sich im Teleskop deutlich strukturiert zeigen. Je weiter diese Galaxien entfernt sind, desto älteres Licht erreicht uns von ihnen, d.h. wir sehen eine 100 Millionen Lichtjahre entfernte Galaxie heute in dem Zustand, wie sie vor 100 Millionen Jahren war aufgrund der enlichen Lichtgeschwindigkeit. Mit immer größeren und besseren Teleskopen kann man immer weiter entferntere Galaxien sichtbar machen.

Nun gehen wir heute davon aus, daß unser Weltall vor ca. 10-15 Milliarden Jahren durch einen Urknall entstanden ist. Daher muß es einen Zeitpunkt gegeben haben, wo sich die ersten Sterne, die ersten Galaxien gebildet haben. Diese ersten Objekte hatten ganz andere Eigenschaften. Sie bestanden nur aus den Relikten des Urknalls, also Wasserstoff, Helium, Deuterium und Lithium. Erst im Laufe der Zeit wurde in den Sternen schwerere Elemente produziert, die dann erst Leben auf Kohlenstoffbasis ermöglichten.

Bei der Entstehung eines Sterns kollabiert eine Molekülwolke unter Eigengravitation. Der anfänglich zentrale Einfall von Materie (Kollaps) geht aufgrund von Drehimpuls über in eine Akkretionsphase, wo Masse in einer protoplanetaren Akkretionsscheibe nach innen auf den Protostern transportiert wird. Schließlich zündet der Stern, wenn Dichte und Temperatur in seinem Innern genügend hoch sind.

Analoge Transportmechanismen gibt es auch in Scheiben um AGNs(Aktive Galaktische Kerne)

In dieser Arbeit sollen erste Schritte im Verständnis dieser primordialen protoplanetaren Akkretionsscheiben gemacht werden.

Um diese Scheiben zu verstehen, wird aufgrund der chemischen Zusammensetzung primordialer Materie ein Großteil dieser Arbeit der Berechnung der Opazität gewidmet. Am Ende folgt ein einfaches Scheibenmodell für nicht-selbstgravitierende primordiale Scheiben mit β-Viskosität.

Die in dieser Arbeit gewonnenen Opazitäten haben über die Scheibenphysik hinaus noch weitreichendere Anwendungsmöglichkeiten in der Modellierung von primordialer Physik (z.B. Sternatmosphären der ersten Sterne, primordialer, protostellarem Kollaps etc.).

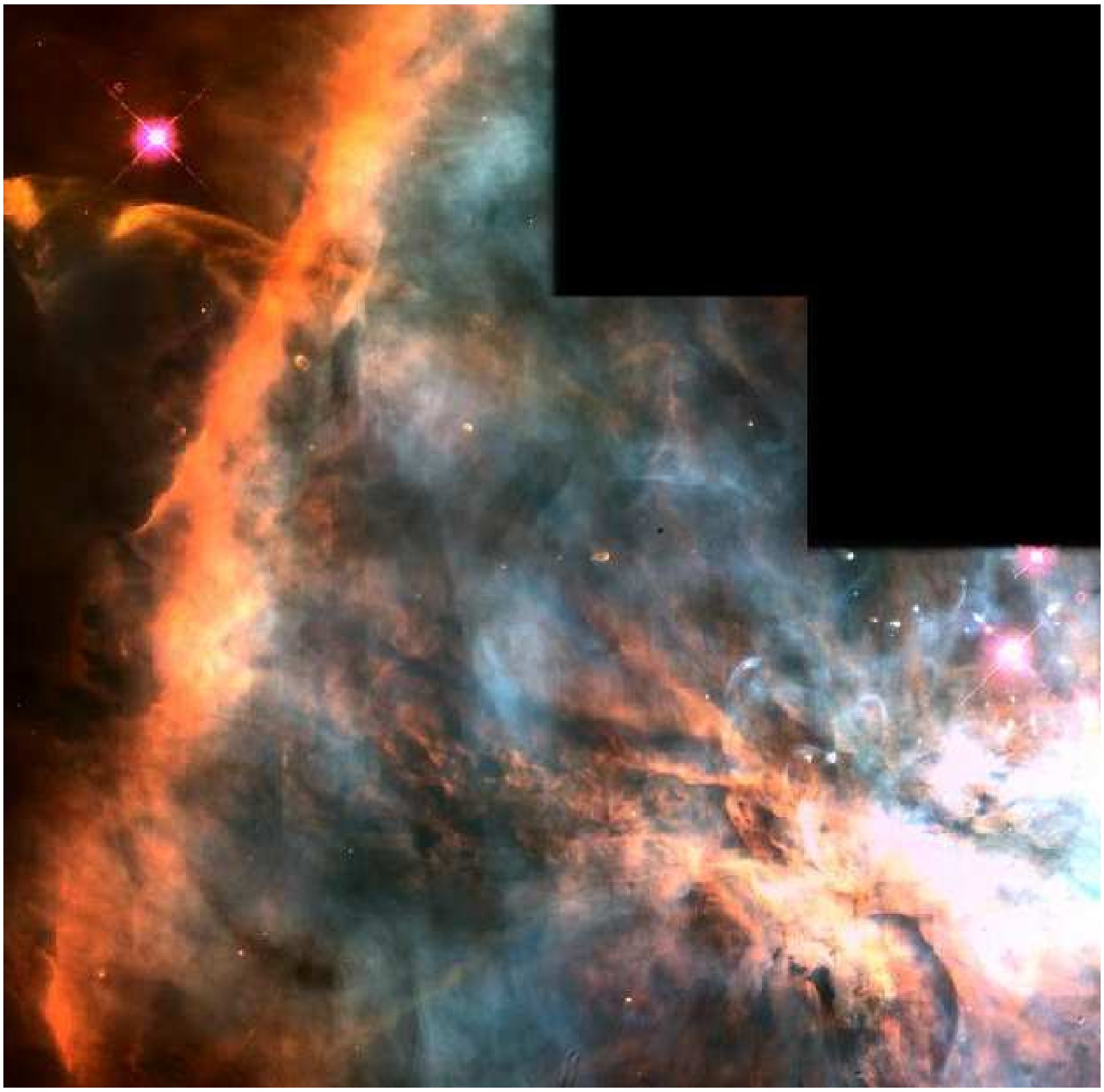


Abbildung 1.1: Beispiel von heutigen protoplanetaren Scheiben aus dem Orion-Nebel (Aufnahme mit der WFPC2 des HST)

Kapitel 2

Scheibenmodell

Das Akkretionsscheibenmodell in dieser Arbeit geht von folgenden Annahmen aus

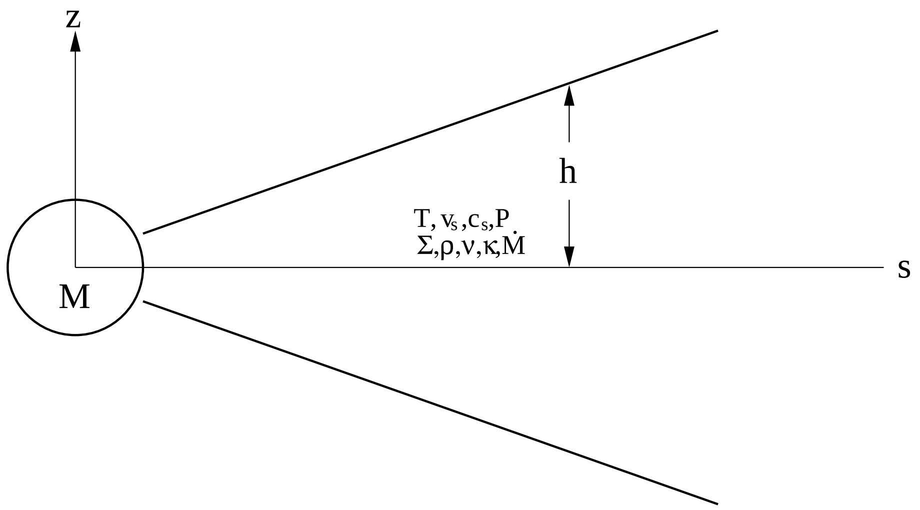
- stationär ($\dot{M}$ konstant)
- Chemie im Gleichgewicht $\tau_{chem} \ll \tau_{visc}$
- optisch dick $\rightarrow$ LTE
- geometrisch dünn ($\frac{h}{s} \ll 1$)
- nicht-selbstgravitierende Scheiben, d.h. $M_{Scheibe} < M_{Stern}$
- isotherm in z-Richtung $\rightarrow$ Einzonenmodell
- Viskosität wird durch β-Viskosität beschrieben
- primordiale Elementmischung X=0.75, Y=0.25 , Z≈0

Das zugehörige System von zu lösenden Gleichungen ist in Abb. 2.1 zusammengestellt.

Das System besteht (abzüglich der Anschlußbedingung) aus 9 Gleichungen für die 9 Unbekannten Σ, H, ρ, T, c_s, v_s, P, τ und ν, welche in Abhängigkeit der Parameter M und $\dot{M}$ für jeden Abstand s gelöst werden können.

Die auftretende Opazität κ ist eine Materialfunktion, abhängig von den beteiligten Spezies und deren Absorptionsprozessen. Sie ist derzeit nur im Temperaturbereich von 1000 - 7000K [Len91] oder über 10^4 K für reine $Z = 0$ Mischung bekannt (OPAL).

Daher soll nun im Folgenden die Opazität einer primordialen Mischung aus Wasserstoff, Deuterium, Helium und Lithium berechnet werden.



$$
\begin{aligned}
q(s) &= 1 - \sqrt{\frac{s}{s_0}} \\
\nu\Sigma &= \frac{\dot{M}q}{3\pi} \\
P &= \rho c_s^2 = \rho \frac{kT}{\mu m_p} \\
\frac{4\sigma}{3\tau} T^4 &= \frac{3}{8\pi} \frac{GM\dot{M}q}{s^3} \\
\tau &= \frac{1}{2} \Sigma \kappa(\rho, T) \\
\rho &= \frac{\Sigma}{2H} \\
v_s &= \frac{\dot{M}}{2\pi s \Sigma} \\
\nu &= \beta s v_\phi = \beta \sqrt{GMs} \\
\frac{P}{\rho H} &= \frac{GMH}{s^3}
\end{aligned}
$$

Σ	Flächendichte	g cm^{-2}
ν	Viskosität	cm^2 s^{-1}
M	Masse des Sterns	g
$\dot{M}$	Massenflußrate	g s^{-1}
v_s	radiale Geschwindigkeit	cm s^{-1}
c_s	Schallgeschwindigkeit	cm s^{-1}
ρ	Dichte	g cm^{-3}
T	Temperatur	K
κ	Opazität	cm^2 g^{-1}
τ	optische Tiefe	1
P	Druck	g s^{-2}
s	Abstand vom Stern	cm
q	Anschlußbedingung bei $s = s_0$	

Abbildung 2.1: Scheibenmodell

Kapitel 3

Opazität

1	Definition der atomaren Anzahlhäufigkeiten
2	Bestimmung der Specieskonzentrationen als $f(\rho, T)$
3	Berechnung der Absorptionskoeffizienten κ_ν
4	(Rosseland- (LTE) oder Planck- (Non-LTE)) Mittelung hier Rosseland : $\kappa_R(\rho, T) = \left(\int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu(\rho,T)} \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} \right)^{-1}$ $\kappa_\nu(\rho, T) = \sum_{i=1}^{\#Absprozesse} \kappa_{\nu,i}(\rho, T)$
5	Ergebnis: $\kappa_R(\rho, T) \longrightarrow$ **Physik**

Abbildung 3.1: Opazitäts-HOWTO

η_{10}	4.5	8.0
X	$7.57 \cdot 10^{-1}$	$7.51 \cdot 10^{-1}$
Y	$2.43 \cdot 10^{-1}$	$2.49 \cdot 10^{-1}$
Z	0	0
H	$9.26 \cdot 10^{-1}$	$9.23 \cdot 10^{-1}$
He	$7.4 \cdot 10^{-2}$	$7.6 \cdot 10^{-2}$
D	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$1.7 \cdot 10^{-5}$
Li	$2.2 \cdot 10^{-10}$	$7.0 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 3.1: Anzahlhäufigkeiten nach [Gal98]

n_{e^-}	x_1
n_{H^-}	x_2
n_H	x_3
n_{H^+}	x_4
n_{H_2}	x_5
$n_{H_2^+}$	x_6
$n_{H_3^+}$	x_{18}

n_D	x_{15}
n_{D^+}	x_{16}
n_{HD}	x_{17}
n_{D_2}	x_{22}
$n_{H_2D^+}$	x_{19}

n_{He}	x_7
n_{He^+}	x_8
$n_{He^{++}}$	x_9
$n_{He_2^+}$	x_{10}

n_{Li}	x_{11}
n_{Li^+}	x_{12}
$n_{Li^{++}}$	x_{21}
n_{Li_2}	x_{20}
n_{LiH}	x_{13}
n_{LiH^+}	x_{14}

Tabelle 3.2: Bezeichnung der Spezies

3.1 Materie mit $Z = 0$

Primordiale Materie enhält alle im Urknall entstandenen Elemente, somit Wasserstoff, Deuterium, Helium und Lithium. Alle schwereren Elemente werden erst in den Sternen durch Kernfusion erzeugt.

Die relative Häufigkeit der Elemente wird in den Parametern X, Y und Z zusammengefaßt. X ist dabei der Massenanteil von Wasserstoff, Y der Anteil von Helium und Z der aller schwereren Elemente (hier $Z = 0$). Als Ausgangspunkt wird hier die in [Gal98] angegebene Verteilung genommen. η_{10} ist ein kosmologischer Parameter. Grob ergibt sich für die Anzahlhäufigkeiten das Verhältnis $H : He : D : Li = 1 : 10^{-1} : 10^{-5} : 10^{-10}$ (siehe Tab. 3.1).

3.1.1 Bestandteile

Betrachtet werden im Rahmen dieser Arbeit 22 Spezies bestehend aus Wasserstoff, Deuterium, Helium und Lithium. Diese sind in Tabelle 3.2 aufgeführt.

3.1.2 Mittleres Molekulargewicht

Das mittlere Molekulargewicht für eine vollständig ionisierte Mischung ist nach [Lan74] definiert zu

$$\mu = \left(\sum_i \frac{X_i(Z_i+1)}{A_i} \right)$$

X_i ist die massengewichtete Häufigkeit, Z_i die Ordnungs- und A_i die Massenzahl des Elements.

	X_i	Z_i	A_i	$\frac{X_i(Z_i+1)}{A_i}$
1	0.758	1	1	1.516
2	$2.78 \cdot 10^{-5}$	1	2	$2.78 \cdot 10^{-5}$
3	0.242	2	4	0.1815
4	$8.18 \cdot 10^{-9}$	3	5	$6.544 \cdot 10^{-9}$

Für diese Mischung erhält man

$$\mu = 0.5891$$

Daß dies nicht ganz der Realität in unseren Scheiben entspricht, ist insbesondere in den äußeren, kalten Gebieten der Scheibe klar, und muß in zukünftigen Studien unbedingt verbessert werden. Der maximale Fehler wird für eine rein atomare/molekulare, nicht ionisierte Mischung erreicht und beträgt ungefähr einen Faktor 4.

3.2 Chemische Zusammensetzung

3.2.1 Zustandssummen

Die Besetzungszahlen in einem Atom oder Molekül folgen der Boltzmann-Statistik. Hat man beispielsweise N_1 Elektronen im Energieniveau E_1 und N_2 in E_2, so ist deren Verhältnis durch

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{-\frac{E_1 - E_2}{kT}} \tag{3.1}$$

g_1 und g_2 sind die statistischen Gewichte der Zustände. Verallgemeinert man nun dies und will den Teil der Atome im Zustand E_n im Verhältnis zu allen anderen Teilchen berechnen, ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{N_n}{N} &= \frac{N_n}{\sum_{p=0}^{\infty} N_p} \\ &= \frac{N_0 \frac{g_n}{g_0} e^{-\frac{E_n - E_0}{kT}}}{\sum_{p=0}^{\infty} N_0 \frac{g_p}{g_0} e^{-\frac{E_p - E_0}{kT}}} \\ &= \frac{g_n e^{-\frac{\Delta E_n}{kT}}}{\sum_{p=0}^{\infty} g_p e^{-\frac{\Delta E_p}{kT}}} \\ &= \frac{g_n e^{-\frac{\Delta E_n}{kT}}}{u(T)} \end{aligned}$$

$u(T)$ ist die sogenannte Zustandssumme des betrachteten Teilchens, ΔE_n ist die Energie relativ zum Grundzustand. Im Allgemeinen schreibt man für die Zustandssumme

$$u(T) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n e^{-\theta \xi_n} \qquad \theta = \frac{5040}{T} \quad \xi_n = \Delta E_n \tag{3.2}$$

Am Beispiel des Wasserstoffatoms mit $\xi_n = 13.6 \left(1 - \frac{1}{n^2}\right)$ eV wird sofort klar: Die Zustandssumme, über alle Zustände summiert, divergiert. Sie muß daher nach endlicher Summation abgebrochen werden:

- viele Autoren setzen ein willkürliches Limit bei beispielsweise 0.1 eV unter der Kontinuumsgrenze ([Sau84], [Irw81])
- bei hohen Dichten können die angeregten Niveaus nicht mehr ungestört exisitieren. Sie wechselwirken mit den benachbarten Teilchen. Es treten Effekte wie Druckionisation und -dissoziation auf. Untersuchungen zu den Auswirkungen dieser Effekte findet man in [Var65a], [Var66b], [Var65b] und [Var66a]. Modernere und exaktere Algorithmen für diese Porblematik wurden von Mihalas, Hummer und Däppen ([Hum88], [Mih88a], [Dae88] und [Mih88b]) entwickelt.

- einfache Abschätzung: Sei n_H die Teilchenzahldichte der Wasserstoff-Atome, so sind sie in einem mittleren Abstand $d = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_H}}$ verteilt. Die Radien der Elektronenbahnen folgen nach Bohr dem $a = a_0 \nu^2$ Gesetz. Setzt man für die Überlagerung die Bedingung $d = \frac{a}{2}$ an, so darf nur $\nu < \left(\frac{6}{\pi n_H a_0^3}\right)^{\frac{1}{6}}$ summiert werden. (Beispiel $n_H = 10^{20}$ cm^{-3}, $\nu < 7.11$, im Innern der Sonne : $n_H \approx 10^{26}$ cm^{-3}, $\nu < 0.13$, d.h. H vollständig ionisiert)

3.2.2 Sahagleichungen

Betrachten wir zunächst einen Ionisationsprozeß

$$A + h\nu \longrightarrow A^+ + e^-$$

Zunächst seien alle Spezies im Grundzustand. Anfangszustand ist das Teilchen A mit dem statistischen Gewicht $g_{A,0}$, Endzustand ist das Teilchen A^+ mit dem statistischen Gewicht $g_{A_0^+}$ und das Elektron mit Impuls p_e aus $[p_e, p_e + dp_e]$. Das Gewicht des Endzustands ist somit das Produkt $g_{A_0^+} dg(p_e)$. Nach dem Pauli-Prinzip enthält das Volumen $dq_1 dq_2 dq_3 dp_1 dp_2 dp_3 = dV d^3p$ $\frac{g_e dV d^3p}{h^3}$ Elektronen pro Einheitszelle der Größe h^3 ($g_e = 2$). dV ist durch $1/n_e$ gegeben, $d^3p_e = 4\pi p_e^2 dp_e$. Damit

$$dg(p_e) = \frac{g_e dV d^3p}{h^3} = \frac{g_e 4\pi p_e^2 dp_e}{n_e h^3}$$

Damit können wir mit der Boltzmannverteilung (thermodyn. Gleichgewicht) ansetzen:

$$\frac{dn_{A^+,0}}{n_{A_0}} = \frac{g_{A_0^+} dg(p_e)}{g_{A,0}} e^{-\frac{\chi_{A_0} + \frac{p_e^2}{2m_e}}{kT}} = \frac{g_{A_0^+} g_e}{g_{A_0}} \frac{4\pi p_e^2 dp_e}{n_e h^3} e^{-\frac{\chi_A + \frac{p_e^2}{2m_e}}{kT}}$$

$\chi_A + \frac{p_e^2}{2m_e}$ ist die Energie des Elektrons relativ zu seinem ursprünglichen gebundenen Zustand. Integriert man die Gleichung auf beiden Seiten, ergibt sich

$$\frac{n_{A^+}}{n_A} = \frac{g_{A_0^+} g_e}{g_{A,0}} \frac{4\pi}{n_e h^3} e^{-\frac{\chi_A}{kT}} \int_0^\infty p_e^2 e^{-\frac{p_e^2}{2m_e kT}} dp_e$$

Mit der für $a > 0$ gültigen Lösung $\int_0^\infty x^2 e^{-a^2x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^3}$ folgt

$$\frac{n_{A_0^+} n_e}{n_{A_0}} = \frac{g_{A_0^+} g_e}{g_{A_0}} \frac{4\pi}{h^3} e^{-\frac{\chi_{A_0}}{kT}} \sqrt{\pi} \, (2m_e kT)^{\frac{3}{2}} = \frac{g_{A_0^+} g_e}{g_{A_0}} e^{-\frac{\chi_A}{kT}} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{3.3}$$

Gibt man nun die anfänglich gemachte Einschränkung auf, nur den Grundzustand zu berücksichtigen, muß man über alle Zustände A_i und A_i^+ summieren. Mit der Boltzmann-Formel folgt

$$n_A = \sum_i n_{A_i} = \frac{n_{A_0}}{g_{A_0}} \sum_i g_{A_i} e^{-\frac{E_{A_i}}{kT}} = \frac{n_{A_0}}{g_{A_0}} u_A(T)$$

und weiterhin

$$\frac{n_{A^+}}{n_A} = \frac{n_{A_0^+} g_{A_0}}{n_{A_0} g_{A_0^+}} \cdot \frac{u_{A^+}(T)}{u_A(T)}$$

Setzt man dies in Gl. 3.3 ein, folgt

$$\frac{n_{A_0^+} n_e}{n_{A_0}} = \frac{u_{A^+}(T) g_e}{u_A(T)} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\chi_A}{kT}} = {}^{n}K_{ion,A}(T) \tag{3.4}$$

Diese Beziehung kann auch ohne weiteres für Dissoziationsgleichgewichte verallgemeinert werden.

3.2.3 Analytik

Nachdem wir nun Gleichgewichtskonstanten definiert haben, können wir unser Gleichungssystem formulieren. Der Einfachheit halber nennen wir die Spezieskonzentrationen um, wie in Tabelle 3.2 beschrieben. Die jeweiligen Konstanten erhält man entweder aus der Literatur oder werden selber berechnet.

Wir haben ein Gleichungssystem mit 19 Gleichungen für 19 Unbekannte zu lösen, welches nichtlinear ist. Daraus ergeben sich Fragen der Eindeutigkeit der Lösung, welche sich aber in der Diskussion als teilweise leicht lösbar herausstellen werden.

Unser Medium enthält die Elemente H, D, He und Li in den (Anzahl-)Häufigkeiten f_H, f_D, f_{He} und f_{Li} (siehe Tablle 3.1). Ihre Summe ergibt 1, daher $f_{He} = 1 - f_H - f_D - f_{Li}$. Wir wollen, abhängig von der Dichte ρ und der Temperatur T die Spezieskonzentrationen bestimmen.

Durch die Elementhäufigkeit ist zunächst ein mittleres Atomgewicht $\bar{u}$ definiert

$$\bar{u} = (f_H + 2f_D + 4f_{He} + 5f_{Li})m_H \tag{3.5}$$

woraus sich die mittlere Atomzahldichte zu $N_0 = \frac{\rho}{\bar{u}}$ ergibt und daraus die Zahlendichten der einzelnen Elemente zu

$$\begin{aligned}
N_H &= f_H N_0 = \frac{f_H}{4 - 3f_H - 2f_D + f_{Li}} \frac{\rho}{m_H} \\
N_D &= f_D N_0 = \frac{f_D}{4 - 3f_H - 2f_D + f_{Li}} \frac{\rho}{m_H} \\
N_{He} &= f_{He} N_0 = \frac{1 - f_H - f_D - f_{Li}}{4 - 3f_H - 2f_D + f_{Li}} \frac{\rho}{m_H} \\
N_{Li} &= f_{Li} N_0 = \frac{f_{Li}}{4 - 3f_H - 2f_D + f_{Li}} \frac{\rho}{m_H}
\end{aligned}$$

Das Medium ist neutral

$$x_1 + x_2 - x_4 - x_6 - x_8 - 2x_9 - x_{10} - x_{12} - x_{14} - x_{16} - x_{18} - x_{19} - 2x_{21} = 0 \tag{3.6}$$

Diese Neutralität läßt sich iterativ (s.u.) nur erfüllen, solange es nennenswerte Ionenkonzentration gibt. Unter einer gewissen Ionenkonzentration stößt man an die Rechengenauigkeit des Rechners. Daher unterscheidet man ionischer Limit und atomarer/molekularer Limit, wenn Ionen nicht mehr nennenswert vorhanden sind.

Ionischer Limit

Diese Atomzahldichten sind auf die Spezies der Elemente verteilt:

$$N_H = x_2 + x_3 + x_4 + 2x_5 + 2x_6 + 3x_{18} \tag{3.7}$$

$H_2 \leftrightarrow H + H$	$K_{H_2} = \frac{[H]^2}{[H_2]}$	$K_5 = \frac{x_3^2}{x_5}$	D	Fit an [Var65a]
$H^- \leftrightarrow H + e^-$	$K_{H^-} = \frac{[H][e^-]}{[H^-]}$	$K_2 = \frac{x_3 x_1}{x_2}$	I	Saha
$H \leftrightarrow H^+ + e^-$	$K_H = \frac{[H^+][e^-]}{[H]}$	$K_3 = \frac{x_4 x_1}{x_3}$	I	Saha
$H_2^+ \leftrightarrow H + H^+$	$K_{H_2^+} = \frac{[H][H^+]}{[H_2^+]}$	$K_6 = \frac{x_3 x_4}{x_6}$	D	Fit an [Sta94b]
$H_2^+ + H_2 \leftrightarrow H_3^+ + H$	$K_{H_3^+} = \frac{[H_3^+][H]}{[H_2^+][H_2]}$	$K_{18} = \frac{x_{18} x_3}{x_5 x_6}$	D	Fit an [Sid92]

Tabelle 3.3: Gleichgewichte im Wasserstoffsystem

$$N_D = x_{15} + x_{16} + x_{17} + x_{19} + 2x_{22} \tag{3.8}$$
$$N_{He} = x_7 + x_8 + x_9 + 2x_{10} \tag{3.9}$$
$$N_{Li} = x_{11} + x_{12} + x_{21} + x_{13} + x_{14} + 2x_{20} + x_{21} \tag{3.10}$$

H-System Wir betrachten die Gleichgewichte nach Tab. 3.3 und lösen damit Gl. 3.7 nach $x_3 = [H]$ auf. $x_1 = [e^-]$ ist ein Parameter, der erst über die Neutralitätsbedingung 3.6 fixiert wird.

$$x_2 = \frac{x_3 x_1}{K_2} \tag{3.11}$$
$$x_4 = \frac{x_3 K_3}{x_1} \tag{3.12}$$
$$x_5 = \frac{x_3^2}{K_5} \tag{3.13}$$
$$x_6 = \frac{x_3 x_4}{K_6} = \frac{x_3^2 K_3}{K_6 x_1} \tag{3.14}$$
$$x_{18} = \frac{K_{18} x_6 x_5}{x_3} = \frac{K_{18} K_3 x_3^3}{K_5 K_6 x_1} \tag{3.15}$$

Mit Gl. 3.7 erhält man die kubische Gleichung in x_3

$$A_H x_3^3 + B_H x_3^2 + C_H x_3 + D_H = 0 \tag{3.16}$$

mit

$$\begin{aligned} A_H &= K_{18} K_2 K_3 \\ B_H &= 2(K_2 K_6 x_1 + K_2 K_3 K_5) \\ C_H &= (K_5 K_6 x_1^2 + K_2 K_5 K_6 x_1 + K_2 K_3 K_5 K_6) \\ D_H &= -N_H K_2 K_5 K_6 x_1 \end{aligned}$$

$HD \leftrightarrow H+D$	$K_{HD} = \frac{[H][D]}{[HD]}$	$K_{17} = \frac{x_3 x_{15}}{x_{17}}$	D	Saha $u_H = u_D$ u_{HD} calc.
$D_2 \leftrightarrow D+D$	$K_{D_2} = \frac{[D]^2}{[D_2]}$	$K_{22} = \frac{x_{15}^2}{x_{22}}$	D	Saha $u_H = u_D$
$D \leftrightarrow D^+ + e^-$	$K_D = \frac{[D^+][e^-]}{[D]}$	$K_{15} = \frac{x_{16} x_1}{x_{15}}$	I	K_3 (ass.)
$H_3^+ + D$ $\leftrightarrow H_2D^+ + H$	$K_{H_3^+D} = \frac{[H_2D^+][H]}{\left[H_3^+\right][D]}$	$K_{18,15} = \frac{x_{19} x_3}{x_{18} x_{15}}$	D	Fit an [Sid92]
$H_3^+ + HD$ $\leftrightarrow H_2D^+ + H_2$	$K_{H_3^+HD} = \frac{[H_2D^+][H_2]}{\left[H_3^+\right][HD]}$	$K_{18,17} = \frac{x_{19} x_5}{x_{18} x_{17}}$	D	Fit an [Sid92]

Tabelle 3.4: Gleichgewichte im Deuteriumsystem

D-System Hier kann man K_{HD} unberücksichtigt lassen, da diese Konstante schon in $K_{H_3^+D}$ und $K_{H_3^+HD}$ enthalten ist:

$$\frac{K_{HD}}{K_{H_2}} = \frac{K_{H_3^+,HD}}{K_{H_3^+,D}} \qquad \frac{K_{17}}{K_5} = \frac{K_{18,17}}{K_{18,15}}$$

Lösungsvariable ist $x_{15} = [D]$, Parameter sind $x_3 = [H]$, $x_{18} = \left[H_3^+\right]$ und $x_1 = [e^-]$. Es ergibt sich mit Tab. 3.4

$$x_{16} = \frac{K_{15} x_{15}}{x_1} \tag{3.17}$$

$$x_{17} = \frac{K_{18,15} x_5 x_{15}}{K_{18,17} x_3} \tag{3.18}$$

$$x_{19} = \frac{K_{18,15} x_{18} x_{15}}{x_3} \tag{3.19}$$

$$x_{22} = \frac{x_{15}^2}{K_{22}} \tag{3.20}$$

Damit ergibt sich mit 3.8 bei Vernachlässigung von $x_{22} = [D_2]$ die Gleichung

$$(K_{18,17} x_3 x_1 + K_{15} K_{18,17} x_3 + K_{18,15} x_5 x_1 + K_{18,15} K_{18,17} x_{18} x_1)\, x_{15} - (C_D K_{18,17} x_3 x_1) = 0 \tag{3.21}$$

Sonst folgt die quadratische Gleichung

$$A_D x_{15}^2 + B_D x_{15} + C_D = 0 \tag{3.22}$$

mit

$$A_D = 2\frac{x_1 x_3}{K_{22}}$$

$He \leftrightarrow He^+ + e^-$	$K_{He} = \frac{[He^+][e^-]}{[He]}$	$K_7 = \frac{x_8 x_1}{x_7}$	I	Saha
$He^+ \leftrightarrow He^{++} + e^-$	$K_{He^+} = \frac{[He^{++}][e^-]}{[He^+]}$	$K_8 = \frac{x_9 x_1}{x_8}$	I	Saha
$He_2^+ \leftrightarrow He + He^+$	$K_{He_2^+} = \frac{[He][He^+]}{[He_2^+]}$	$K_{10} = \frac{x_7 x_8}{x_1 0}$	D	Fit an [Sta94b]

Tabelle 3.5: Gleichgewichte im Heliumsystem

$$
\begin{aligned}
B_D &= K_{18,17} x_3 x_1 + K_{15} K_{18,17} x_3 + K_{18,15} x_5 x_1 + K_{18,15} K_{18,17} x_{18} x_1 \\
C_D &= -C_D K_{18,17} x_3 x_1
\end{aligned}
$$

He-System Lösungsvariable ist hier $x_7 = [He]$, Parameter $x_1 = [e^-]$.

$$
x_8 = \frac{K_7 x_7}{x_1} \tag{3.23}
$$

$$
x_9 = \frac{K_8 x_8}{x_1} = \frac{K_8 K_7 x_7}{x_1^2} \tag{3.24}
$$

$$
x_{10} = \frac{x_7 x_8}{K_{10}} = \frac{K_7 x_7^2}{K_{10} x_1} \tag{3.25}
$$

Mit 3.9 folgt die quadratische Gleichung in x_7

$$
A_{He} x_7^2 + B_{He} x_7 + C_{He} = 0 \tag{3.26}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
A_{He} &= 2 K_7 x_1 \\
B_{He} &= K_{10} \left(x_1^2 + K_7 x_1 + K_8 K_7 \right) \\
C_{He} &= -N_{He} K_{10} x_1^2
\end{aligned}
$$

$Li \leftrightarrow Li^+ + e^-$	$K_{Li} = \frac{[Li^+][e^-]}{[Li]}$	$K_{11} = \frac{x_{12}x_1}{x_{11}}$	I	(siehe Text)
$Li^+ \leftrightarrow Li^{++} + e^-$	$K_{Li^+} = \frac{[Li^{++}][e^-]}{[Li^+]}$	$K_{12} = \frac{x_{21}x_1}{x_12}$	I	Saha
$Li_2 \leftrightarrow Li + Li$	$K_{Li_2} = \frac{[Li][Li]}{[Li_2]}$	$K_{20} = \frac{x_{11}^2}{x_{20}}$	I	Refit [Sau84]
$LiH \leftrightarrow Li + H$	$K_{LiH,1} = \frac{[Li][H]}{[LiH]}$	$K_{13,1} = \frac{x_{11}x_3}{x_{13}}$	D	Fit an [Sta96]
$LiH \leftrightarrow LiH^+ + e^-$	$K_{LiH,2} = \frac{[LiH^+][e^-]}{[LiH]}$	$K_{13,2} = \frac{x_{14}x_1}{x_{13}}$	I	Fit an [Sta96]
$LiH^+ \leftrightarrow Li^+ + H$	$K_{LiH^+,1} = \frac{[Li^+][H]}{[LiH^+]}$	$K_{14,1} = \frac{x_{12}x_3}{x_{14}}$	D	Fit an [Sta96]
$LiH^+ \leftrightarrow Li + H^+$	$K_{LiH^+,2} = \frac{[Li][H^+]}{[LiH^+]}$	$K_{14,2} = \frac{x_{11}x_4}{x_{14}}$	D	Fit an [Sta96]

Tabelle 3.6: Gleichgewichte im Lithiumsystem

Lithium-System Wie man aus Tab. 3.6 erkennen kann, sind 2 Gleichgewichtskonstanten überflüssig:

$$\frac{K_{LiH,1}}{K_{LiH,2}} = \frac{K_{LiH^+,2}}{K_H} = \frac{K_{LiH^+,1}}{K_{Li}} \qquad \frac{K_{13,1}}{K_{13,2}} = \frac{K_{14,2}}{K_3} = \frac{K_{14,1}}{K_{11}}$$

Es bleiben K_{Li} und $K_{LiH^+,2}$ unberücksichtigt.

Lösungsvariable ist $x_{13} = [LiH]$, Parameter $x_3 = [H]$ und $x_1 = [e^-]$:

$$x_{11} = \frac{x_{13}K_{13,1}}{x_3} \tag{3.27}$$

$$x_{12} = \frac{x_{13}K_{14,1}K_{13,2}}{x_3x_1} \tag{3.28}$$

$$x_{14} = \frac{x_{13}K_{13,2}}{x_1} \tag{3.29}$$

$$x_{20} = \frac{x_{11}^2}{K_{20}} = \frac{x_{13}^2K_{13,1}^2}{K_{20}x_3^2} \tag{3.30}$$

$$x_{21} = \frac{K_{12}x_{12}}{x_1} = \frac{K_{12}K_{14,1}K_{13,2}x_{13}}{x_3x_1^2} \tag{3.31}$$

Damit folgt aus Gl. 3.10 bei Vernachlässigung von $x_{20} = [Li_2]$ und $x_{21} = [Li^{++}]$

$$(K_{13,1}x_1 + x_3x_1 + K_{13,2}(K_{14,1} + x_3))\, x_{13} - N_{Li}x_3x_1 = 0 \tag{3.32}$$

sowie bei deren Berücksichtigung die in $x_{13} = [LiH]$ quadratische Gleichung

$$A_{Li}x_{13}^2 + B_{Li}x_{13} + C_{Li} = 0 \tag{3.33}$$

mit

$$A_{Li} = \frac{K_{13,1}^2x_1}{K_{20}x_3}$$

$$\begin{aligned} B_{Li} &= K_{13,1}x_1 + x_1x_3 + K_{13,2}\left(K_{14,1} + x_3\right) + \frac{K_{12}K_{14,1}K_{13,1}}{x_1} \\ C_{Li} &= N_{Li}x_1x_3 \end{aligned}$$

Ladungsneutralität Wir haben nun $x_{2...19}$ in Abhängigkeit von x_1 gelöst. In Beziehung 3.6 eingesetzt, könnte man nach $x_1 = [e^-]$ auflösen. Da die Gleichung hochgradig nichtlinear ist, verwenden wir hier ein Iterationsverfahren: Ein x_1 ist vorgegeben, die Gröšen $x_{2...19}$ werden berechnet und damit aus 3.6 ein x_1^* berechnet. Die genäherte Lösung ist dann $x_1^{**} = \sqrt{x_1^* x_1}$ und dient als Ausgangswert für die nächste Iteration. Nach ca. 20-50 Iterationen ist eine sehr gute Konvergenz erreicht.

Molekularer/Atomarer Limit

Nur neutrale Moleküle/Atome sind in nennenswertem Umfang vorhanden.

$$\begin{aligned} N_H &= x_3 + 2x_5 && (3.34) \\ N_D &= x_{15} + x_{17} + 2x_{22} && (3.35) \\ N_{He} &= x_7 && (3.36) \\ N_{Li} &= x_{11} + x_{21} + x_{13} + 2x_{20} && (3.37) \end{aligned}$$

H-System Mit Gl. 3.34 und Tab. 3.3 folgt die quadratische Gleichung in x_5

$$4x_5^2 - \left(4C_H + K_5\right)x_5 + C_H^2 = 0 \tag{3.38}$$

D-System Mit Gl. 3.35 und Tab. 3.4 folgt die quadratische Gleichung in x_{17}

$$K_{17}^2 x_{17}^2 + K_{22}x_3\left(x_3 + K_{17}\right)x_{17} - C_D K_{22} x_3^2 = 0 \tag{3.39}$$

He-System Mit Gl. 3.36 und Tab. 3.5 folgt die triviale Gleichung für x_7

$$x_7 - C_{He} = 0 \tag{3.40}$$

Li-System Mit Gl. 3.37 und Tab. 3.6 folgt die quadratische Gleichung in x_{13}

$$K_{13,1}^2 x_{13}^2 + x_3K_{20}\left(K_{13,1} + x_3\right)x_{13} - C_{Li}x_3^2K_{20} = 0 \tag{3.41}$$

Zur Eindeutigkeit und Positivität der Lösungen

Alle Bestimmungsgleichungen in den 4 Elementsystemen sind entweder lineare, quadratische, oder kubische Gleichungen in der jeweilgen Lösungsvariablen. Alle auftretenden Variablen sind positiv.

Die linearen Gleichungen 3.21,3.32 und 3.40 haben die Form

$$Ax - B = 0$$

und haben wegen $A > 0$ und $B > 0$ eine eindeutige positive Lösung.

Die quadratischen Gleichungen 3.22, 3.26, 3.33, 3.38, 3.39 und 3.41 sind von der Gestalt

$$Ax^2 + Bx + C = 0$$

mit $A > 0$, $B > 0$ $C < 0$. Die Steigung dieser quadratischen Funktion $(2Ax + B)$ ist für positive x immer positiv, daher kann es nur einen Nulldurchgang geben. $f(0) = C < 0$ und $\lim_{x\to+\infty} f(x) \to +\infty$ liefern die Randbedingungen, wonach es im Intervall $[0, \infty]$ eine Nullstelle von $f(x)$ geben muš.

Analoges gilt für die kubische Gleichung 3.16

$$Ax^3 + Bx^2 + Cx + D = 0$$

mit $A, B, C > 0$ und $D < 0$ mit derselben Argument für Steigung und Randwertbedingung bei $x = 0$ und $x \to +\infty$

3.2.4 Ergebnisse

In Abb. 3.2 wird beispielhaft für $\rho = 10^{-5}$ g cm^{-3} die Spezieskonzentration der Elemente in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Die Neutralisierung der Ionen bei hohen Temperaturen ist nicht realistisch und auf das Zusammenbrechen von Polynomfits zurückzuführen.

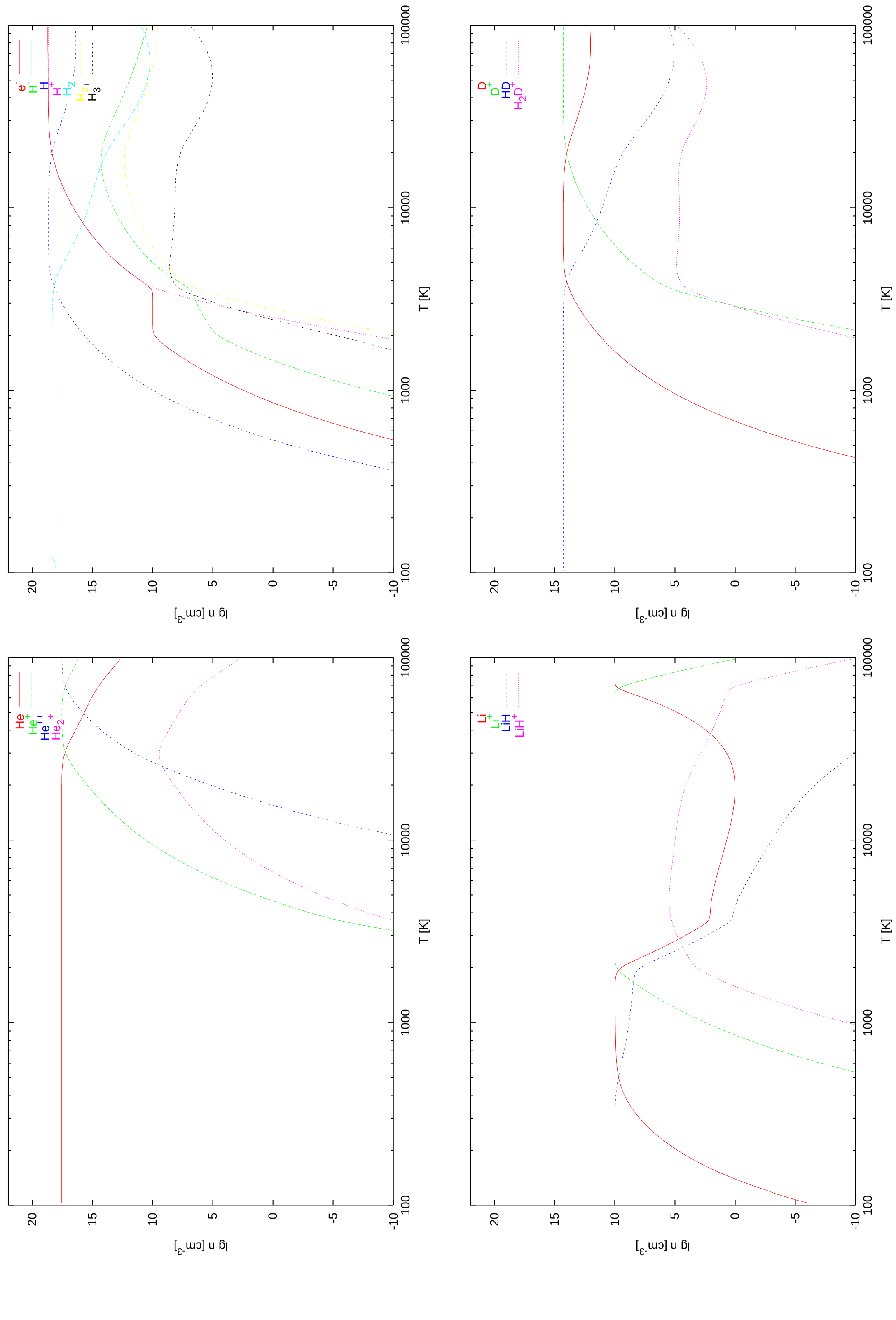


Abbildung 3.2: Beispiel der Spezieskonzentration für $\rho = 10^{-5}$ g cm^{-3}

3.3 Absorptionsprozesse

Im Folgenden sollen alle berücksichtigten Absorptionsprozesse betrachtet werden hinischtlich Theorie, vorhandener Daten etc.

3.3.1 Thomson-Streuung

Die Streuung von Photonen an Elektronen wird als Thomson-Streuung bezeichnet:

$$e^- + h\nu \longrightarrow e^- + h\nu \tag{3.42}$$

Die Kraft, die eine linear polarisierte elektromagnetische Welle auf ein Elektron ausübt, ist

$$\vec{F} = e\vec{E}_0 \sin \omega_0 t$$

Das Elektron erfährt damit eine Beschleunigung $\vec{F} = m\ddot{\vec{r}}$. Im Dipolmoment $\vec{d} = e\vec{r}$ ergibt sich die Differentialgleichung einer Schwingung

$$\ddot{\vec{d}} = -\omega_0^2 \vec{d} \qquad \text{mit der Amplitude} \qquad d_0 = \frac{e^2 \vec{E}_0}{m\omega_0^2} \tag{3.43}$$

Die abgestrahlte Dipol-Strahlung ist(zeitliche Mittelung ergibt einen Faktor $\frac{1}{2}$)

$$\langle P \rangle = \frac{2\left\langle \ddot{\vec{d}}^2 \right\rangle}{3c^3} = \frac{e^4 \vec{E}_0^2}{3m^2c^3}$$

Der Strahlungsstrom der einfallenden Welle (zeitlich gemittelter Poynting-Vektor) ist

$$\langle S \rangle = \frac{c}{8\pi} \vec{E}_0^2$$

Daraus definiert sich ein Wirkungsquerschnitt

$$\sigma = \frac{\langle P \rangle}{\langle S \rangle} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4}{m^2 c^4} = \frac{8\pi}{3} r_0^2$$

r_0 ist der klassische Elektronenradius.

Der Thomson-Wirkungsquerschnitt ergibt sich zu (Daten aus [Cox00])

$$\sigma_{Th} = \frac{8}{3}\pi a^2 = 6.6525 \cdot 10^{-25}\text{cm}^2 \tag{3.44}$$

3.3.2 Rayleigh-Streuung

Bei der Rayleigh-Streuung handelt es sich um durch das Strahlungsfeld erzwungene harmonische Oszillationen (Die Strahlung wechselwirkt mit dem Dipolmoment des neutralen Atoms oder Moleküls)

Die Kräftebilanz des Teilchens(Atom oder Molekül) liefert die DGL

$$m\ddot{x} = -m\omega_0^2 + m\tau\dddot{x} + eE_0 \sin \omega t \tag{3.45}$$

Die auftretenden Terme sind von links nach rechts die Newtonsche Beschleunigung, die harmonische Rückstell-, die Dämpfungs-, und die Anregungskraft.

Löst man die DGL mit dem Standardansatz im Komplexen

$$x = x_0 e^{i\omega t} = |x_0|\, e^{i(\omega t + \delta)}$$

folgt

$$x_0 = -\frac{eE_0}{m}\frac{1}{\omega_2 - \omega_0^2 - i\omega_0^3\tau} \qquad \delta = \tan^{-1}\left(\frac{\omega^3\tau}{\omega^2 - \omega_0^2}\right)$$

Die zeitlich gemittelte Abstrahlung ist damit

$$P = \frac{e^2\,|x_0|^2}{3c^3} = \frac{E_0^2 e^4}{3m^2c^3}\frac{\omega^4}{\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)^2 + \left(\omega_0^3\tau\right)^2}$$

Mit dem zeitlich gemittelten Poynting-Vektor folgt

$$\sigma(\omega) = \frac{P}{S} = \frac{8\pi}{3}\frac{e^4}{m^2c^4}\frac{\omega^4}{\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)^2 + \left(\omega_0^3\tau\right)^2} = \sigma_T\frac{\omega^4}{\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)^2 + \left(\omega_0^3\tau\right)^2}$$

Man unterscheidet 3 Bereiche

- $\omega \ll \omega_0$: Hier ist
  $$\sigma(\omega) = \sigma_T\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4$$
  Das Elektron ist mit dem Strahlungsfeld in Phase : Dies nennt man **Rayleigh-Streuung**

- $\omega \approx \omega_0$: Hier ist $\omega - \omega_0 \approx 0$. Man definiert $\Gamma = \omega_0\tau$ und erhält
  $$\sigma(\omega) = \frac{\pi\sigma_T}{2\tau}\frac{\frac{\Gamma}{2\pi}}{\left(\omega - \omega_0\right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$$
  In diesem Bereich entspricht $\sigma(\omega)$ einem Lorentz-Profil.

- $\omega \gg \omega_0$: Hier folgt $\sigma(\omega) = \sigma_T$. Die Bindungsenergie des Elektrons kann vernachlässigt werden. Es ist quasi frei und macht **Thomson-Streuung**

3.3.3 Gebunden-frei Streuung

Ionisation

Bei der Ionisation absorbiert ein gebundenes Elektron (Bindungsenergie E_B) ein Photon der Energie $h\nu$ und wird dadurch in den ungebunden Zustand gehoben. Das Elektron emittiert ein Photon der Energie $h\nu' = h\nu - E_B$. Damit ist klar, daß das Photon eine gewisse Energie, die Bindungsenergie des Zustandes, mitbringen muß, um zu ionisieren.

Da es in Atomen und Molekülen viele gebundene Zustände geben kann, muß man über alle Partialwirkungsquerschnitte der Ionisation aus jedem einzelnen Energieniveau, gewichtet mit der Besetzungszahldichte summieren.

Der Wirkungsquerschnitt ergibt sich damit zu

$$\sigma(\omega,T) = \frac{\sum_{n,l} g_{n,l} e^{-\frac{E_{0,0}-E_{n,l}}{k_B T}} \sigma_{n,l}(\omega)}{Q_A} \qquad \sigma_{n,l} = \frac{2}{3}\frac{\pi e^2}{mc} E_\nu M_{kN,nl} \tag{3.46}$$

Jeder Partialwirkungsquerschnitt ergibt sich aus dem jeweiligen Matrixelement M des Übergangs.

Dissoziation

Ein Molekül AB wird durch Absorption eines Photons dissoziieren. Das gestreute Photon trägt dabei die Energie $h\nu' = h\nu - E_B = E_{ph} - E_B$ weg.

Der anfängliche Zustand wird durch die Quantenzahlen $N'' = N' \pm 1$ und ν'', das reemittierte Photon wird durch die Drehimpulsquantenzahl N' und der Wellenzahl $k' = \sqrt{4\pi\mu\nu}$ beschrieben. Für den Wirkungsquerschnitt (die mit der Besetzungszahldichte gemittelten Partialwirkungsquerschnitte) folgt

$$\sigma(\omega,T) = \frac{\sum_{\nu''}\sum_{N''} g_{\nu''N''} e^{-\frac{E_B - E_{\nu''N''}}{k_B T}} \frac{2}{3}\frac{\pi e^2}{mc} E_{ph} M_{k'N',\nu'N''}}{Q_{AB}(T)} \tag{3.47}$$

M ist wieder das Matrixelement des Übergangs. (Formalismus nach [Arg74] und [Kir88])

3.3.4 Frei-frei-Streuung

Ein Elektron wird im Feld eines positiv geladenen Ions beschleunigt und emittiert aufgrund dessen Photonen. Die Abgestrahlte Energie pro Volumen, Zeit und Frequenzintervall ist

$$\frac{dW}{dV\,dt\,d\nu} = \frac{2^5\pi e^6}{3mc^3}\left(\frac{2\pi}{k_B m}\right)^{\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}} Z^2 n_e n_i e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} g_{ff}(\nu,T)$$

g_{ff} ist der Gaunt-Faktor.

Durch das Kirchoffgesetz $j_\nu = \alpha_\nu B_\nu(T)$ ist der Absorptionskoeffizient $\alpha_\nu = \sigma n_i$ mit der Emissivität $j_\nu = \frac{1}{4\pi}\frac{dW}{dtdVd\nu}$ und der Planck-Funktion B_ν verknüpft.

Es folgt

$$\sigma(\nu,T) = \frac{4e^6}{3mhc}\left(\frac{2\pi}{3k_Bm}\right)^{\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}} Z^2 n_e \frac{1-e^{-\frac{h\nu}{k_BT}}}{\nu^3} g_{ff}(\nu,T) \tag{3.48}$$

3.3.5 Kollisions-induzierte Absorption

Bei der Kollisions-induzierten Absorption handelt es sich um Linienabsorption, d.h. es sind gebunden-gebunden-Übergänge. Die kollidierenden Teilchen bilden ein quasi-gebundenes System und können durch Photonabsorption in angeregte Zustände gelangen. Normalerweise fallen Linien durch Rosselandmittelung nicht ins Gewicht. Diese Absorption muš man aber dennoch berücksichtigen, da sie aufgrund der sehr kurzen Lebenszeit der gebundenen Dimerzustände sehr diffuse Spektren ausbilden.

Abhängig von der Frequenz des Photons werden Translations- (RT) und Vibrations- (F und O_ν) Freiheitsgrad angeregt. Die Vibrationsfrequenz der Grundschwingung des molekularen Wasserstoffs liegt beispielsweise bei 4161 cm^{-1}. Man erhält bei Vielfachen dieser Frequenz Oberschwingungen. Aufgrund der Aufspaltung in Drehimpulszustände besteht z.B. Das Fundamentalband aus allen Übergängen mit $\Delta\nu = 1$ und $\Delta J = 2$ bei H_2/H_2- und $\Delta J = 1$ bei H_2/He (Unterschiede durch Symmetrie bei H_4-Dimer. Daher besteht jedes Vibrationsband aus vielen Linien, die für hohe Temperaturen so stark verbreitert werden, daß sie ein gemeinsames Maximum ausbilden. Bei Temperaturen unterhalb von 1000 K werden die Spektren demgegenüber sehr fein strukturiert, da die therm. Verbreiterung abnimmt.

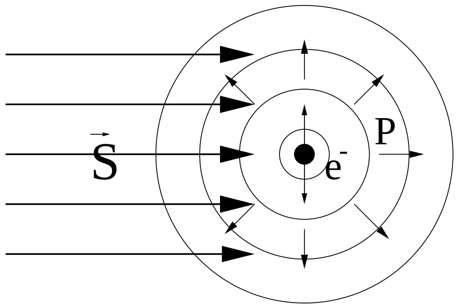
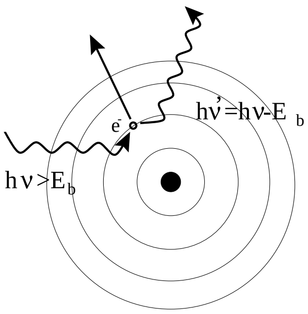
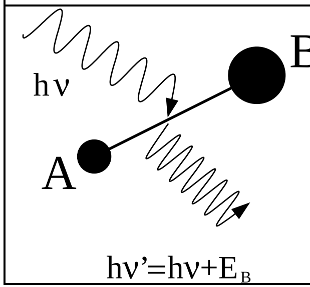
<table>
<tr><th colspan="3">Rayleigh- und Thomsonstreuung</th></tr>
<tr><td rowspan="5">
</td><td colspan="2">$m\ddot{x} = -m\omega_0^2 x + m\tau\dddot{x} + eE_0 \sin\omega t$</td></tr>
<tr><td colspan="2">$\sigma(\omega) = \sigma_T \frac{\omega^4}{\left(\omega^2-\omega_0^2\right)^2+\left(\omega_0^3\tau\right)^2}$</td></tr>
<tr><td>$\omega \ll \omega_0$</td><td>$\sigma(\omega) = \sigma_T \left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^4$, Rayleighstreuung</td></tr>
<tr><td>$\omega \approx \omega_0$</td><td>$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_T}{2\tau} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(\omega-\omega_0)^2+\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$, Lorentzprofil</td></tr>
<tr><td>$\omega \gg \omega_0$</td><td>$\sigma(\omega) = \sigma_T$, Thomsonstreuung</td></tr>
<tr><th colspan="3">Gebunden-frei-Streuung</th></tr>
<tr><td rowspan="2">
</td><td colspan="2">Ionisation</td></tr>
<tr><td colspan="2">$\sigma(\omega,T) = \frac{\sum_{n,l} n_{n,l}\sigma_{n,l}}{n}$
$\sigma(\omega,T) = \frac{\sum_{n,l} g_{n,l} e^{-\frac{E_{0,0}-E_{n,l}}{k_B T}} \sigma_{n,l}(\omega)}{Q_A}$
für H: $\sigma_n(\nu) = \alpha_0 \frac{Z^4}{n^5} g_n(\nu) \frac{1}{\nu^3}$</td></tr>
<tr><td rowspan="2">
</td><td colspan="2">Dissoziation</td></tr>
<tr><td colspan="2">$\sigma(\omega,T) = \frac{\sum_{\nu''}\sum_{N''} g_{\nu''N''} e^{-\frac{E_B-E_{\nu''N''}}{k_B T}} \frac{2}{3}\frac{\pi e^2}{mc} E_{ph} M_{k'N',\nu'N''}}{Q_{AB}(T)}$
(Formalismus nach [Arg74] und [Kir88])</td></tr>
</table>

Tabelle 3.7: Übersicht über die Absorptionsprozesse 1

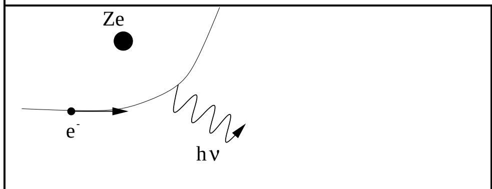
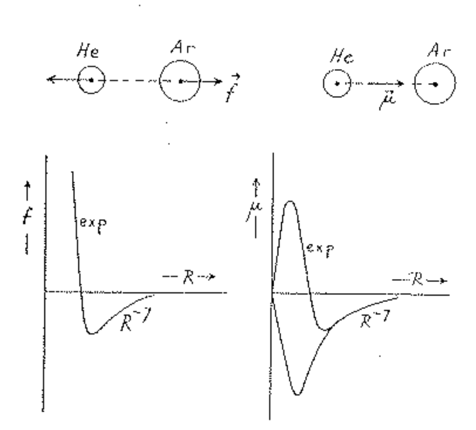
<table>
<tr><th colspan="2">Frei-frei-Streuung</th></tr>
<tr><td>
</td><td>$\sigma(\nu,T) = \frac{4e^6}{3mhc}\left(\frac{2\pi}{3k_B m}\right)^{\frac{1}{2}} T^{-\frac{1}{2}} Z^2 n_e \frac{1-e^{-\frac{h\nu}{k_B T}}}{\nu^3} g_{ff}(\nu,T)$</td></tr>
<tr><th colspan="2">Kollisionsinduzierte Absorption (CIA)</th></tr>
<tr><td>
</td><td>$\sigma(\nu,T) = \frac{4\pi^2}{3hc} n_A n_B \nu \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right) g\left(\nu,T\right)$
(Abbildung aus [van74])</td></tr>
</table>

Tabelle 3.8: Übersicht über die Absorptionsprozesse 2

Th	$e^- + h\nu \to e^- + h\nu'$	$\sigma_{Th} = 6.625 \cdot 10^{-25}$	cm^2	[Cox00]
Ray	$H_2 + h\nu \to H_2 + h\nu$	$\sigma_{Ray}(H_2) = 8.14 \cdot 10^{-13}\lambda^{-4}\cdot$ $(1 + 1.752 \cdot 10^6\lambda^{-2} + 1.681 \cdot 10^{12}\lambda^{-4} +)$	cm^2	λ in $\mathring{A}$, [Dal68]
	$H + h\nu \to H + h\nu'$	$\sigma_{Ray}(H) = 5.799 \cdot 10^{-13}\lambda^{-4}\cdot$ $(1 + 2.452 \cdot 10^6\lambda^{-2} + 4.801 \cdot 10^{13}\lambda^{-4} + \ldots)$	cm^2	λ in $\mathring{A}$, [Kur70]
	$He + h\nu \to He + h\nu'$	$\sigma_{Ray}(He) = 5.484 \cdot 10^{-14}\lambda^{-4}\cdot$ $(1 + 2.44 \cdot 10^5\lambda^{-2} + \ldots)$	cm^2	λ in $\mathring{A}$, [Kur70]
bf	$H^- + h\nu \to H + e^-$	$\sigma_{bf} H^- =$ $10^{-18}\lambda^3 \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{n=1}^{6} C_n \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)^{\frac{n-1}{2}}$	cm^2	$\lambda > \lambda_0 = 1.6419\mu$ m, $[\lambda] = \mu m$, [Wis79], [Joh88]
	$H + h\nu \to H^+ + e^-$	$\sigma_{bf}(H) = \frac{\sum_n \alpha_0 g_n e^{-\frac{E_0 - E_n}{k_B T}} \frac{Z^4}{n^5} g_n(\nu) \frac{1}{\nu^3}}{Q_H}$	cm^2	g_n aus [Mih67]
	$He + h\nu \to He^+ + e^-$	$\sigma_{bf}(He) = \frac{\sum_i \alpha_0 g_i e^{-\frac{E_0 - E_i}{k_B T}} 10^{\alpha_i - \beta_i \log\nu}}{Q_{He}}$	cm^2	[Hun67]
	$He^+ + h\nu \to He^{++} + e^-$	$\sigma_{bf}(He^+) = \sigma_{bf}(H) \quad \text{mit} \quad \frac{(E_0 - E_n)_{He}}{(E_0 - E_n)_H} = 4$	cm^2	[Hun67]
ff	$H + e^- + h\nu \to H + e^-$	$\sigma_{ff}(H^-) = 10^{-29} \sum_{n=1}^{6} \left(\frac{5040}{T}\right)^{\frac{n+1}{2}} \cdot$ $\left(\lambda^2 A_n + B_n + \frac{C_n}{\lambda} + \frac{D_n}{\lambda^2} + \frac{E_n}{\lambda^3} + \frac{F_n}{\lambda^4}\right)$	cm^4 dyn^{-1}	$[\lambda] = \mu$ m [Bel87], [Joh88]
	$H_2 + e^- + h\nu \to H_2 + e^-$	$\sigma_{ff}(H_2^-) = P_3^a(T_4)\nu_4^{-2} + P_3^b(T_4)\nu_4^c$	cm^4 dyn^{-1}	Fit an [Bel80]
	$He + e^- + h\nu \to He + e^-$	$\sigma_{ff}(He^-) = P_4^a(T_4)\nu_4^{-2} + P_4^b(T_4)\nu_4^c$	cm^4 dyn^{-1}	Fit an [Bel92]
	$H^+ + H + h\nu \to H^+ + H$	$\sigma_{ff}(H^+ + H) = P_{4,2}^{a_{ij}} (\log_{10}\nu_5, \log_{10} T_4)$	cm^5	Fit an [Sta94a]
	$He^+ + He + h\nu \to He^+ + He$	$\sigma_{ff}(He^+ + He) = P_{4,2}^{a_{ij}} (\log_{10}\nu_5, \log_{10} T_4)$	cm^5	Fit an [Sta94a]
	$H^+ + e^- + h\nu \to H^+ + e^-$	$\sigma_{ff}(H) = 3.692 \cdot 10^8 g_{ff}(\nu, T)\, \nu^{-3} T^{-\frac{1}{2}}$	cm^5	[Ryb79], g_{ff} aus [Sut98]
	$H_3^+ + e^- + h\nu \to H_3^+ + e^-$	$\sigma_{ff}(H_3) = \sigma_{ff}(H)$	cm^5	
	$H_2^+ + e^- + h\nu \to H_2^+ + e^-$	$\sigma_{ff}(H_2) = \sigma_{ff}(H)$	cm^5	
	$He_2^+ + e^- + h\nu \to He_2^+ + e^-$	$\sigma_{ff}(He_2) = \sigma_{ff}(H)$	cm^5	
	$He^+ + e^- + h\nu \to He^+ + e^-$	$\sigma_{ff}(He) = \sigma_{ff}(H)$	cm^5	
	$He^{++} + e^- + h\nu \to He^{++} + e^-$	$\sigma_{ff}(He^+) = \sigma_{ff}(H)$	cm^5	
diss	$H_2^+ + h\nu \to H^+ + H$	$\sigma_{diss}(H_2^+)$	cm^2	[Sta94a], Splines
	$He_2^+ + h\nu \to He^+ + He$	$\sigma_{diss}(He_2^+)$	cm^2	[Sta94a], Splines

Tabelle 3.9: Referenzen auf Absorptionsprozesse 1

CIA	$H_2 + H_2 + h\nu \rightarrow H_2 + H_2$	$\alpha(\omega, T) = \frac{2\pi^2}{3hc} N_L^2 \rho_{H_2}^2 \bar{\omega} \left(1 - e^{-\frac{h\omega\omega}{kT}}\right) g(\bar{\omega}, T)$	cm^{-1} $amagat^{-2}$	RT F O_1 O_2	40-300 K [Bor85] 20-350 K [Bor91] 20-500 K [Zhe95] 40-500 K [Fu,00] [Bro99] 1000-7000 K [Bor01]
	$H_2 + He + h\nu \rightarrow H_2 + He$	$\alpha(\omega, T) =$ $\frac{4\pi^2}{3hc} N_L^2 \rho_{H_2} \rho_{He} \bar{\omega} \left(1 - e^{-\frac{h\omega\omega}{kT}}\right) g(\bar{\omega}, T)$	cm^{-1} $amagat^{-2}$	RT F O_ν	40-3000 K [Bor88] 20-7000 K [Bor89b] 20-7000 K [Bor89a]
	$H + He + h\nu \rightarrow H + He$	$\alpha(\omega, T) = \frac{4\pi^2}{3hc} N_L^2 \rho_H \rho_{He} \bar{\omega} \left(1 - e^{-\frac{h\omega\omega}{kT}}\right) g(\bar{\omega}, T)$	cm^{-1} $amagat^{-2}$	RT	1500-10000 K [Gus01a]

Unberücksichtigte Absorptionsprozesse		
bf	$D + h\nu \rightarrow D^+$ $Li + h\nu \rightarrow Li^+$ $Li^+ + h\nu \rightarrow Li^{++}$	Wasserstoffähnliche Kanten, nur kleinere Häufigkeit, $\sigma < 10^{-18}$ cm^2 Wasserstoffartig gerechnet mit Energieniveaus aus [Bas75], Absorption aus dem Grundzustand aus [Ver96]: $\sigma < 10^{-18}$ cm^2 $\sigma < 10^{-18}$ cm^2, $f_{Li} \ll 1$
ff	$Li^+, Li^{++}, D^+, LiH^+$	$f_{Li^+,Li^{++},D^+,LiH^+} \ll 1$
diss	$H_2 + h\nu \rightarrow H + H$ $LiH + h\nu \rightarrow Li + H$ $LiH^+ + h\nu \rightarrow Li^+ + H$ $LiH^+ + h\nu \rightarrow Li + H^+$ $HD + h\nu \rightarrow H + D$	Threshold bei $E = 14.67$ eV Daten aus [Kir78], wegen $f_{Li} \ll 1$ und σ_{max} bei $\lambda = 276.1$ nm vernachlässigbar dito dito $f_D \ll 1$
CIA	$HD + H_2 + h\nu \rightarrow HD + H_2$ $HD + He + h\nu \rightarrow HD + He$ $HD + H + h\nu \rightarrow HD + H$ CIA HD/X, LiH/X ...	$f_{HD} \leq f_D \ll f_H$ [Gus01b], Abs. $\approx 10^{-6}$ cm^{-1} amagat^{-2} bei ähnl. λ wie H_2/H_2 CIA, $f_{HD} \leq f_D \ll f_{He}$ $f_{HD} \leq f_D \ll f_H$ $f_{X,LiH,HD} \ll f_H$

Tabelle 3.10: Referenzen auf Absorptionsprozesse 2

3.4 Rosseland-Mittelung

Wenn die freie Weglänge eines Photons klein verglichen mit der charakteristischen Länge in dem jeweiligen Objekt ist, wo sich das Photon aufhält, kann man den Strahlungstransport als Diffusion auffassen und in der sogenannten Diffusionsnäherung rechnen. Solche Bedingungen hat man z.B. im Sterninnern oder auch in optisch dicken Gebieten von Akkretionsscheiben.

Der diffusive Energiefluß F_ν von Strahlung aus dem Frequenzintervall $[\nu, \nu + d\nu]$ ist

$$F_\nu = D_\nu \nabla U_\nu \qquad \text{mit} \qquad D_\nu = \frac{1}{3} c l_\nu = \frac{c}{3\kappa_\nu \rho} \tag{3.49}$$

Die Energiedichte U_ν ist gegeben durch

$$U_\nu = \frac{4\pi}{c} B_\nu(T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Bildet man den Gradienten der Energiedichte, erhält man mittels Kettenregel den Gradienten in der Temperatur, multipliziert mit der partiellen Ableitung der Planckfunktion nach der Temperatur. Setzt man dies in Gl. 3.49 ein, ergibt sich

$$F_\nu = \frac{4\pi}{3\kappa_\nu \rho} \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} \nabla T$$

Integriert man über alle Frequenzen, folgt

$$F = \int_0^\infty F_\nu d\nu = \frac{4\pi}{3\rho} \left(\int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} \right) \nabla T$$

Rechnet man dies alles ferequenzunabhängig, stößt man auf eine Gleichung für F,

$$F = \frac{4\sigma c}{3} \frac{T^3}{\kappa \rho} \nabla T$$

woraus sofort durch Koeffizientenvergleich

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{\pi}{\sigma c T^3} \int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu} \frac{\partial B_\nu(T)}{\partial T} d\nu \tag{3.50}$$

das sogenannte Rosselandmittel.

3.5 Das κ_R-Gebirge

Ein beispielhafter $\kappa_R(\rho, T)$-Plot befindet sich in Abb. 3.3.

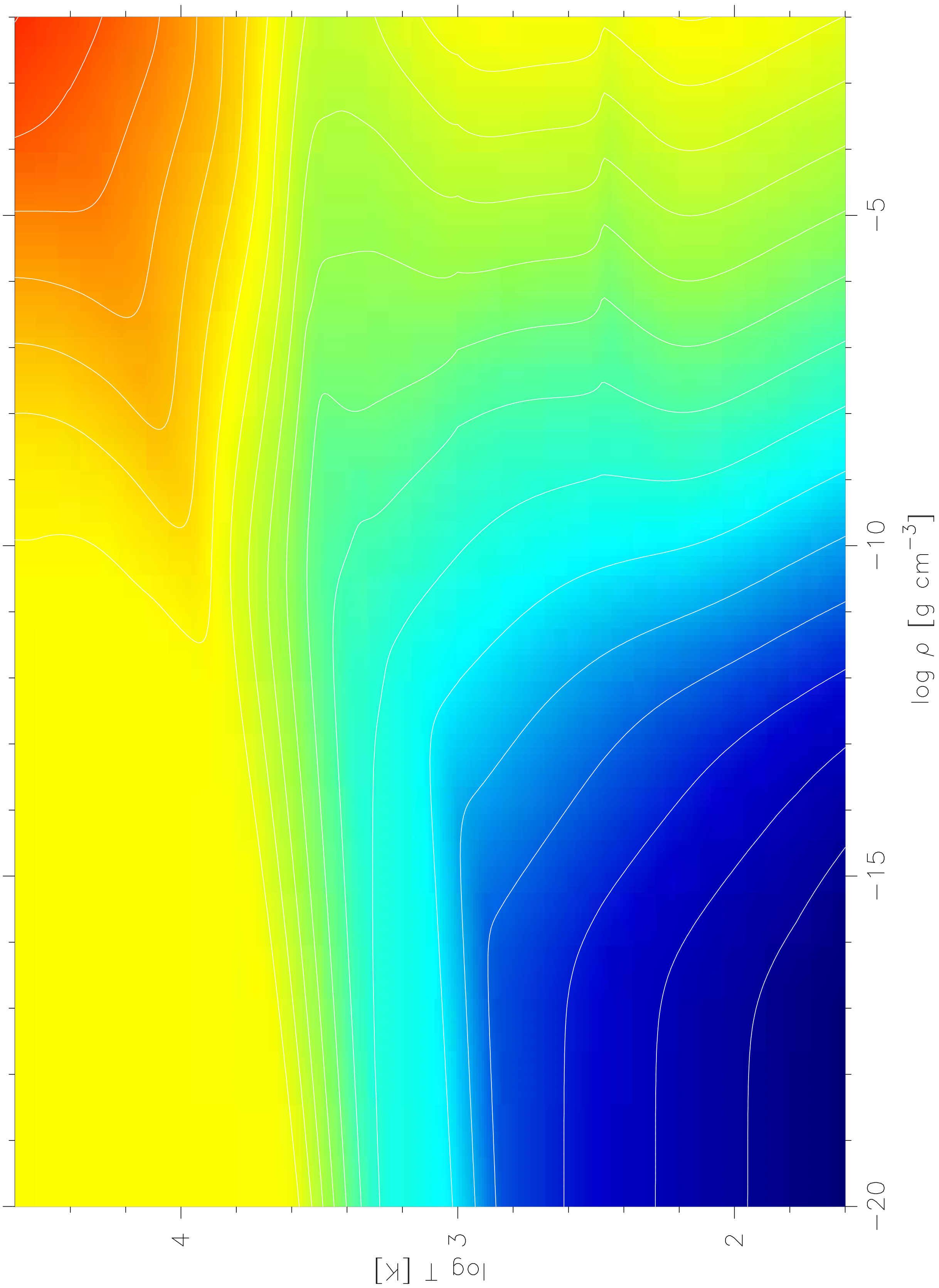


Abbildung 3.3: Das κ_R-Gebirge für $f_{Li} = 2 \cdot 10^{-10}$, $\kappa_R = 10^{-14} \ldots 10^{6}$ cm^2 g^{-1}

3.6 Diskussion

Im Folgenden soll der Ort der dominierenden Absorptionsarten, -prozesse und der Absorber untersucht werden.

3.6.1 Beispielhafte Spektren

In Fig. 3.4 werden einige charakteristische Absorptionsfeatures gezeigt.

3.6.2 Der Einfluß von Lithium

Absorptionen von Deuterium und Lithium bleiben hier unberücksichtigt (Begründung siehe Tabelle 3.8). Die Spezies beider Elemente werden aber in der Gleichgewichtschemie trotz der geringen relativen Häufigkeit berücksichtigt.

Es stellt sich heraus, daß die Eigenschaft des Alkali-Metalls Lithium, leicht ionisierbar zu sein, hier bei sehr niedrigen Temperaturen schon freie Elektronen bildet, welche u.a. zur Produktion von H^- oder einfach nur für Thomson-Streuung verwendet werden können.

Das Verhältnis von κ_R mit Lithium zu dem ohne Lithium erreicht in einem (ρ, T)-Streifen von 600-4000 K Werte bis zu ≈ 100 (siehe Abb. 3.5).

Eine Untersuchung der Änderung der Absorptionsregimes ist in Abb. 3.6-3.8 gezeigt.

Dabei wurden jeweils von κ_ν alle Spektren subtrahiert, die zu dem jeweiligen Absorber, zu der jeweiligen Absorptionsart und -prozess gehören und das Verhältnis des Rosselandmittels des Gesamt-Spektrums mit den Rosselandmitteln des Teilspektrums gebildet. Fällt der Absorber... nicht ins Gewicht, ist das Verhältnis 1, ansonsten ist es größer 1. Derjenige Absorber..., für den dieses Verhältnis maximal ist, ist der dominierende bei diesem (ρ, T).

3.6.3 Vergleich mit anderen Opazitätsrechnungen

Der Vergleich mit Lenzuni [Len91] (Abb. 3.9) zeigt

- für Temperaturen größer als 3000 K hat man eine sehr gute Übereinstimmung im Bereich von 10 %
- darunter wegen CIA teils erhebliche Abweichungen. Dies liegt an der erstmaligen Verwendung der quantenmechanisch gewonnenen Absorptionskoeffizienten nach Borysow et al. in Opazitätsrechnungen.

Die gute Übereinstimmung trotz der teilweise vereinfachten Annahmen (Saha-Theorie, keine wirklich realistische Zustandssumme wie bei MHD-Theorie (Mihalas-Hummer-Daeppen,

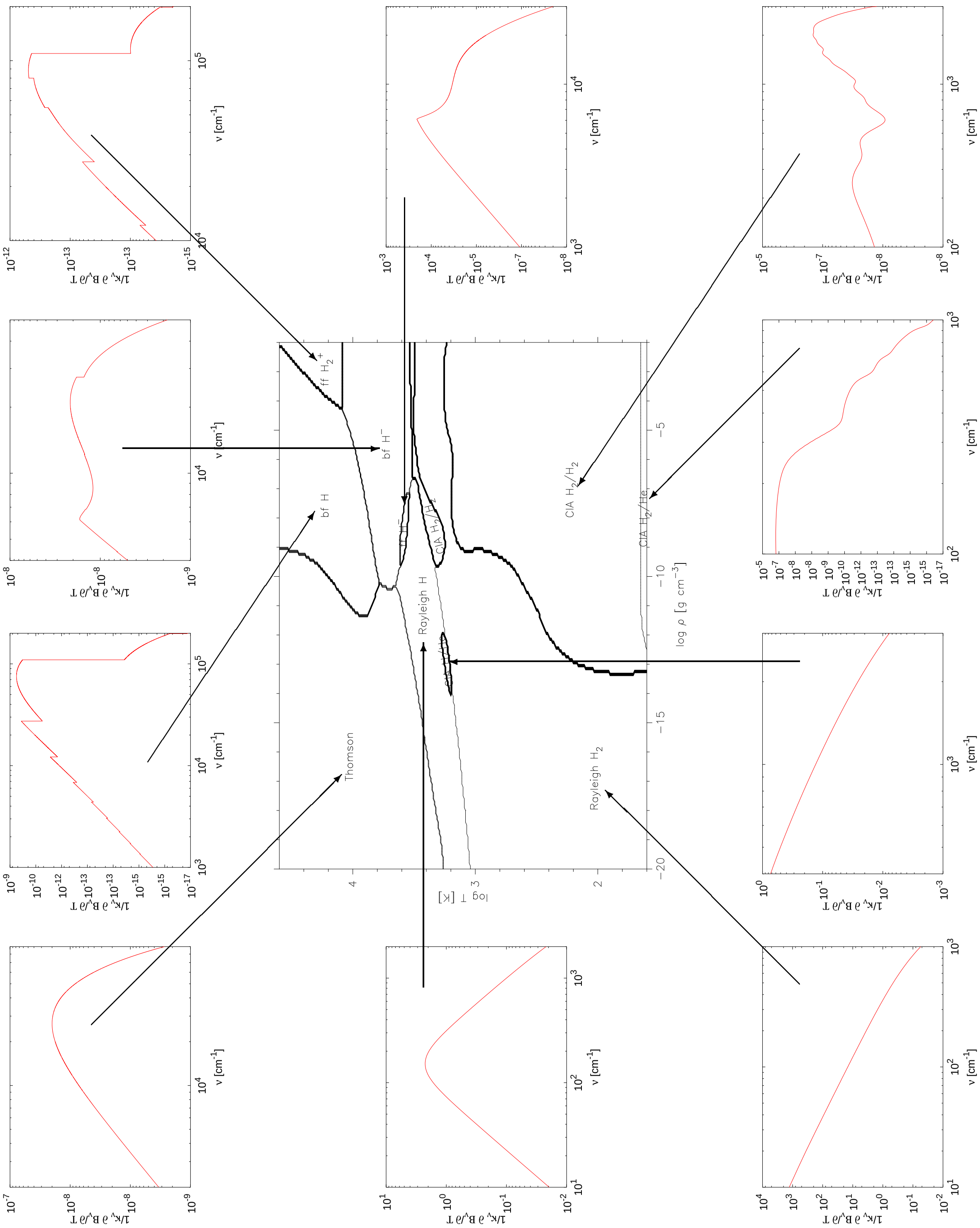


Abbildung 3.4: Beispielhafte Spektren der einzelnen Absorptionsregimes

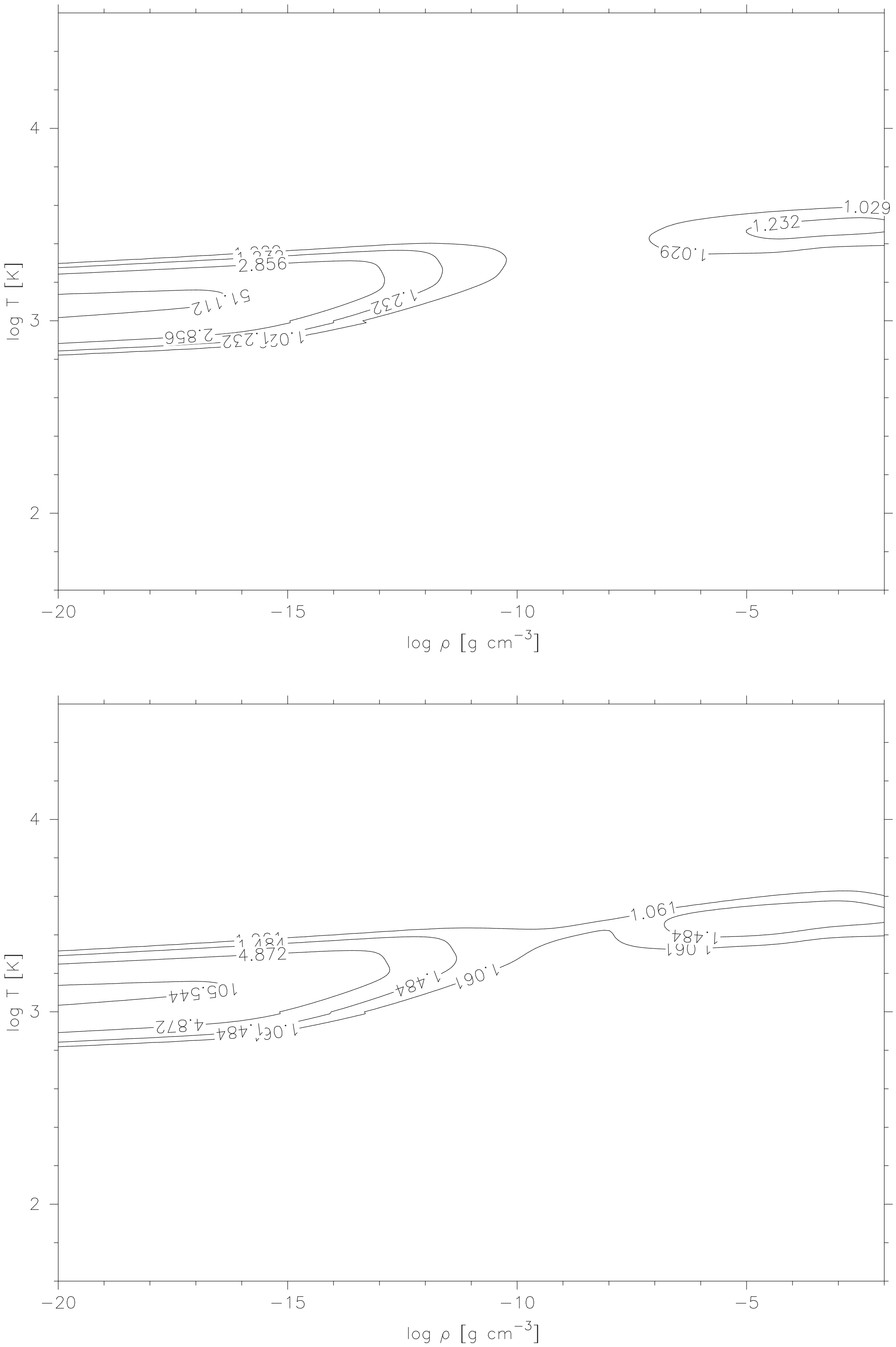


Abbildung 3.5: Der Einfluß von Lithium auf die Opazität. oben: $f_{Li} = 2 \cdot 10^{-10}$, unten: $f_{Li} = 2 \cdot 10^{-9}$

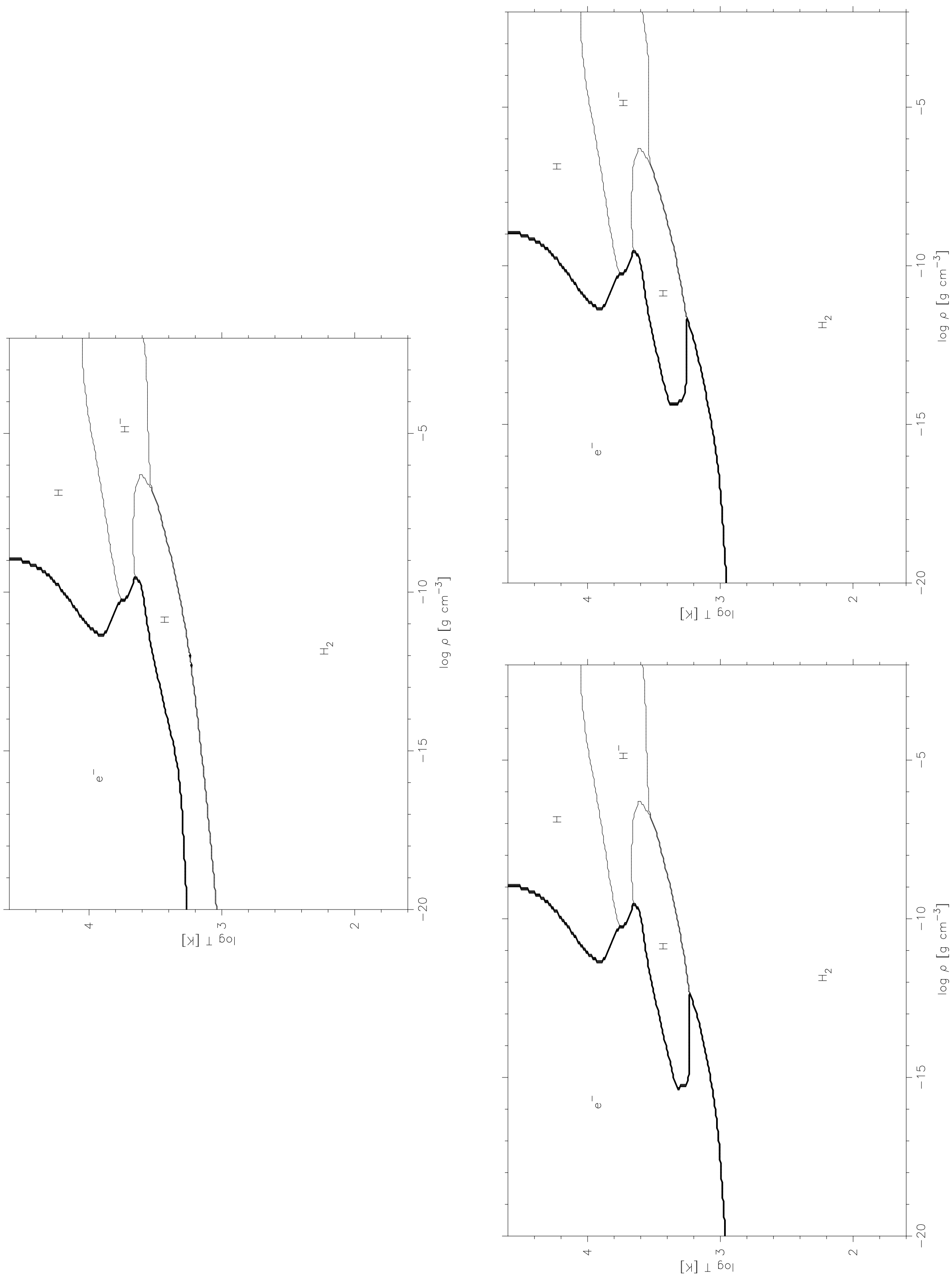


Abbildung 3.6: Absorber für $f_{Li} = 0$ (links), $f_{Li} = 2 \cdot 10^{-10}$ (rechts unten) und $f_{Li} = 2 \cdot 10^{-9}$ (rechts oben)

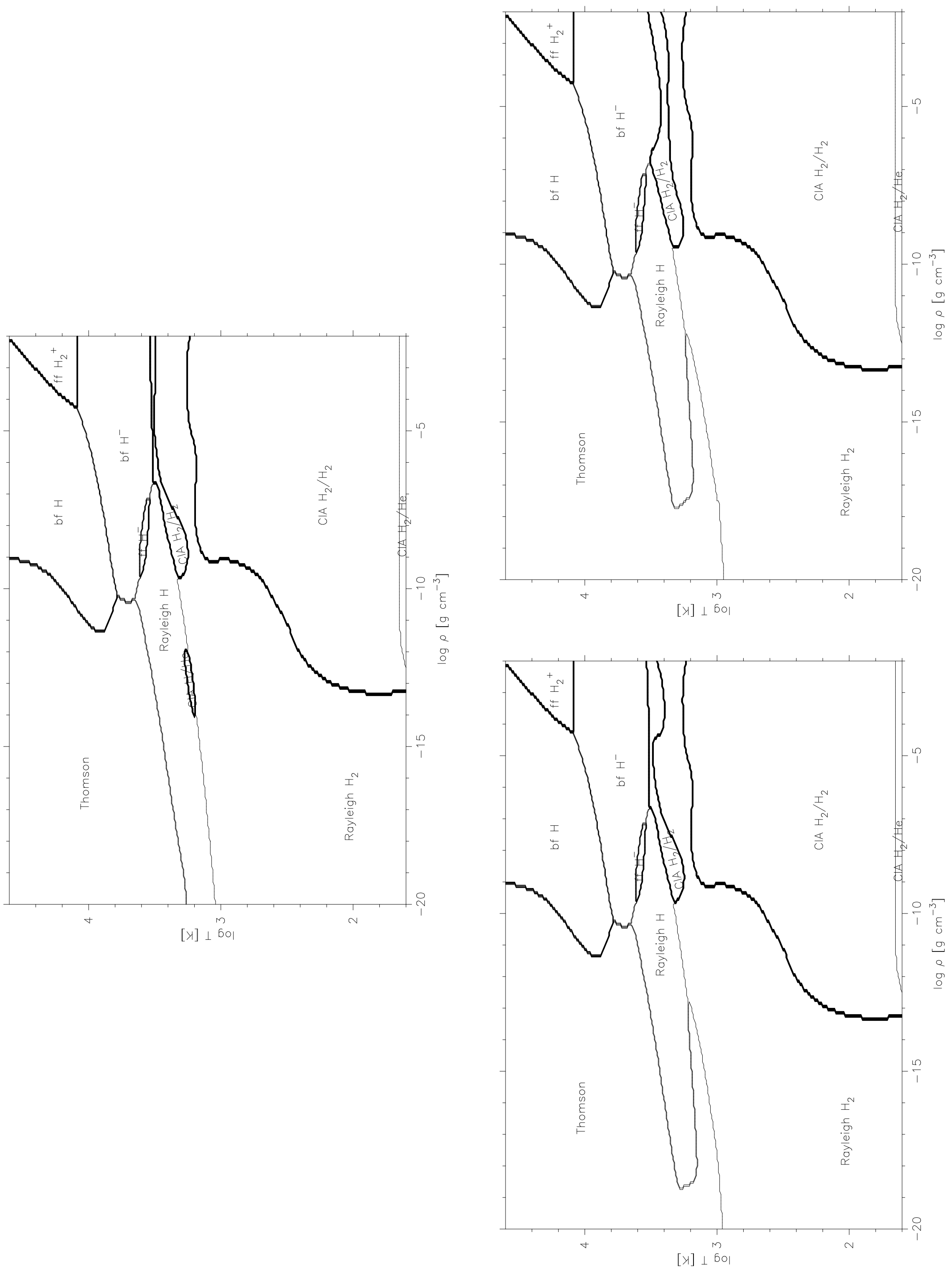


Abbildung 3.7: Absorptionsprozesse (f_{Li} wie bei Abb. 3.6)

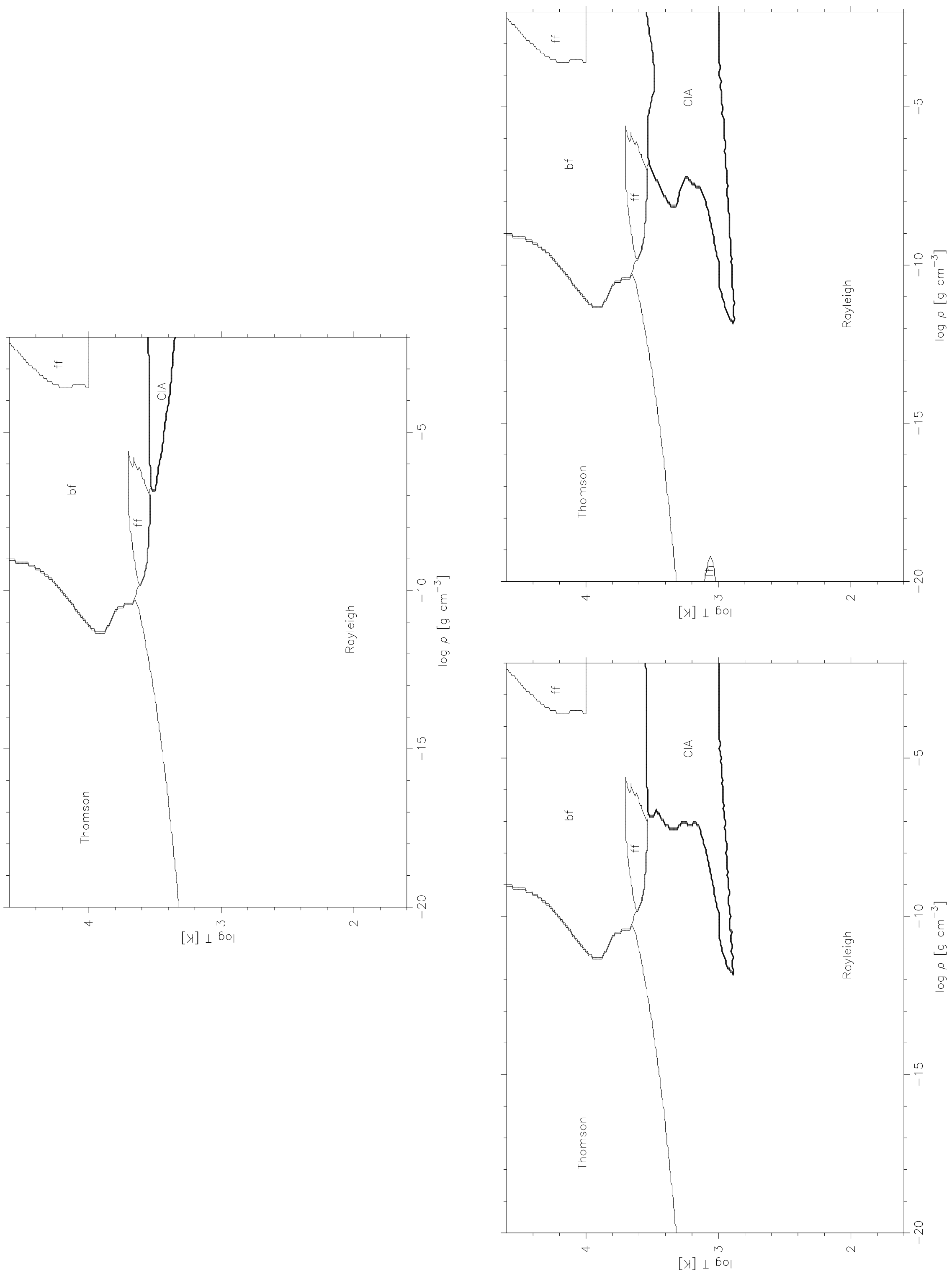


Abbildung 3.8: Absorptionsarten (f_{Li} wie bei Abb. 3.6)

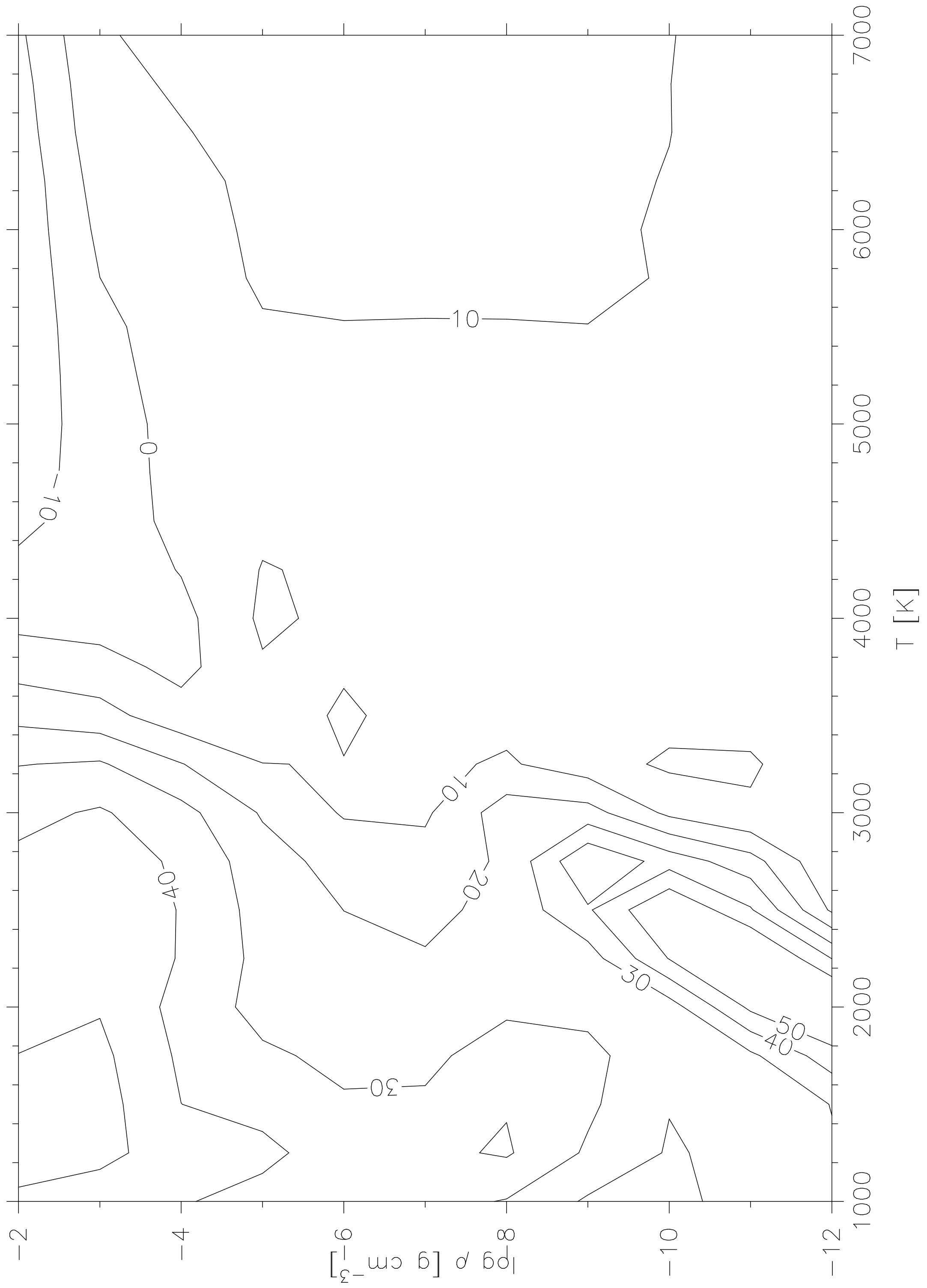


Abbildung 3.9: Vergleich der Opazität für $f_{Li} = 0$ mit den Opazitäten nach [Len91]

[Hum88], [Mih88a], [Dae88], [Mih88b], keine Stoßionisation und -dissoziation) ist bemerkenswert. Lenzuni et al. lösen noch Ratengleichungen für die Übergänge der einzelnen Energieniveaus der Spezies. Dennoch hat man hier unter den gemachten Vereinfachungen recht gute Übereinstimmung.

Kapitel 4

Primordiale Scheiben

Da $\kappa_R(\rho,T)$ nur in Tabellenform gegeben ist, folgt aus den Scheibengleichungen in Kapitel 2 ein Gleichungssystem für ρ und T

$$\begin{aligned} f_\rho(\rho,T) &= AT\rho^2 + C = 0 \\ f_T(\rho,T) &= T^4 - D\kappa \end{aligned}$$

Da ρ und T positiv sind, geht man zu logarithmischen Variablen über.

$$\begin{aligned} f_\rho(\rho,T) &= A10^T 10^{2\rho} + C = 0 \\ f_T(\rho,T) &= 10^{4T} - D10^\kappa = 0 \end{aligned}$$

mit

$$A = \frac{k}{\mu m_p} \qquad C = -\frac{GM\Sigma^2}{4s^3} \qquad D = \frac{3}{64\pi^2}\frac{GM\dot{M}^2q^2}{s^3\sigma\beta\sqrt{GMs}}$$

Ansatz durch ein 2D-Newton-Verfahren liefert

$$\begin{pmatrix} \rho_{n+1} \\ T_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_n \\ T_n \end{pmatrix} - \frac{1}{Det}\begin{pmatrix} \frac{\partial f'_T}{\partial T} & -\frac{\partial f'_\rho}{\partial T} \\ -\frac{\partial f'_T}{\partial \rho} & \frac{\partial f'_\rho}{\partial \rho} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f'_\rho(\rho_n,T_n) \\ f'_T(\rho_n,T_n) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} f'_\rho(\rho,T) &= T + 2\rho - \log_{10}\left(-\frac{A}{C}\right) = 0 \\ f'_T(\rho,T) &= 4T - \kappa - \log_{10} D = 0 \end{aligned}$$

Damit wird die Newton-Iteration sehr einfach

$$\frac{\partial f'_\rho}{\partial \rho} = 2 \qquad \frac{\partial f'_\rho}{\partial T} = 1 \qquad \frac{\partial f'_T}{\partial \rho} = -\frac{\partial \kappa}{\partial \rho} \qquad \frac{\partial f'_T}{\partial T} = 4 - \frac{\partial \kappa}{\partial T}$$

Die Ableitungen sind als logarithmische Ableitungen zu verstehen

Alle Scheiben werdem mit $M = 1M_\odot$, $\beta = 10^{-3}$, $R_S = 7\cdot 10^{10}$ cm, $\mu = 0.5897$ und $\dot{M}$ variabel gerechnet.

4.1 Ergebnisse

Die mechanischen Größen Σ, ν und v_s (siehe Abb. 4.1) sind in der β-Viskositätsbeschreibung von der Thermodynamik entkoppelt, daher stellen sie auch glatte Funktionen dar.

$$\nu = \beta\sqrt{GMs} \qquad \Sigma = \frac{\dot{M}q}{3\pi\nu} = \frac{\dot{M}q}{3\pi\beta\sqrt{GMs}} \qquad v_s = \frac{\dot{M}}{2\pi s\Sigma} = \frac{3\beta}{2}\sqrt{\frac{GM}{s}}$$

Bei den an die Opazität gekoppelten Größen ergeben sich mehrere Instabilitäten:

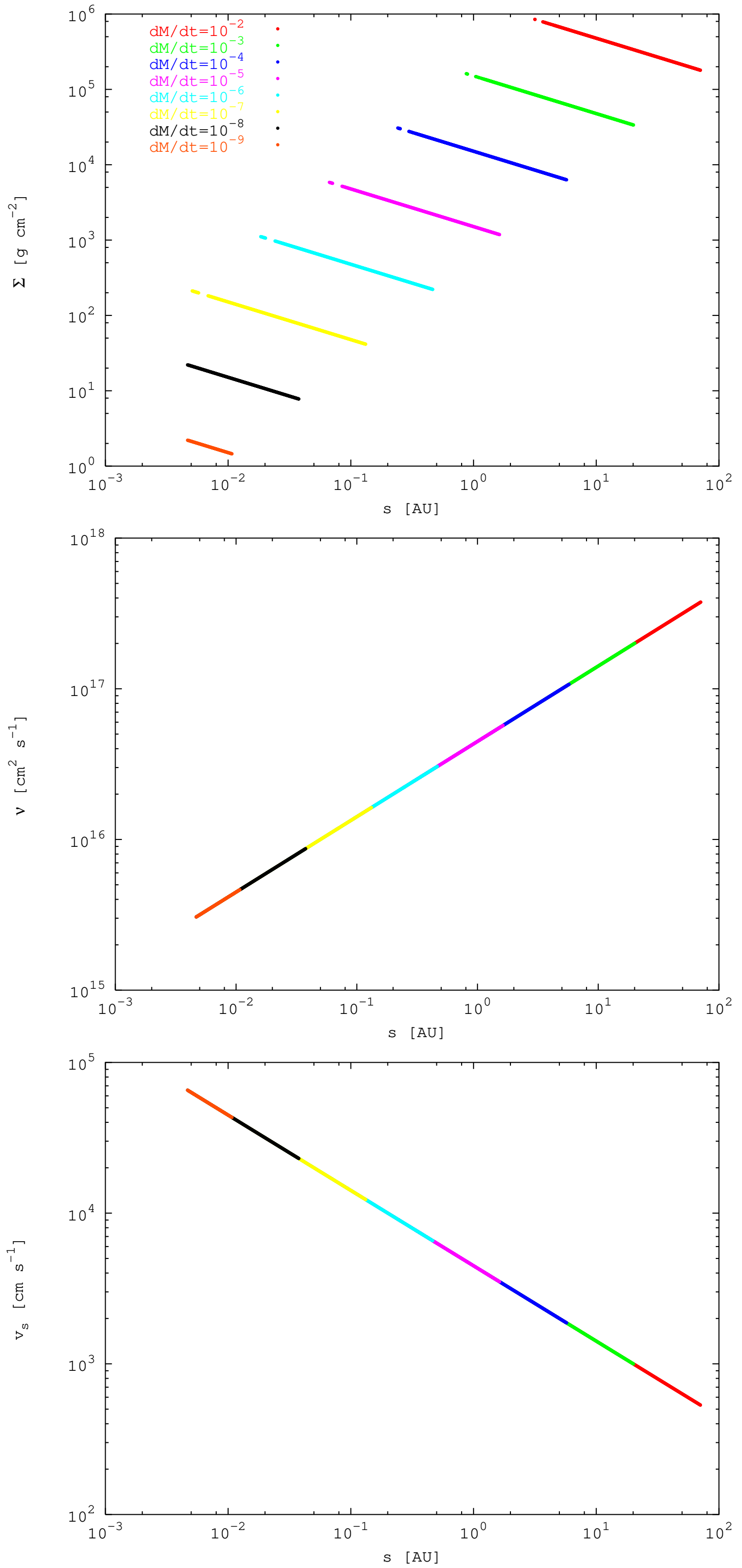


Abbildung 4.1: Die mechanischen Größen Σ, ν und v_s

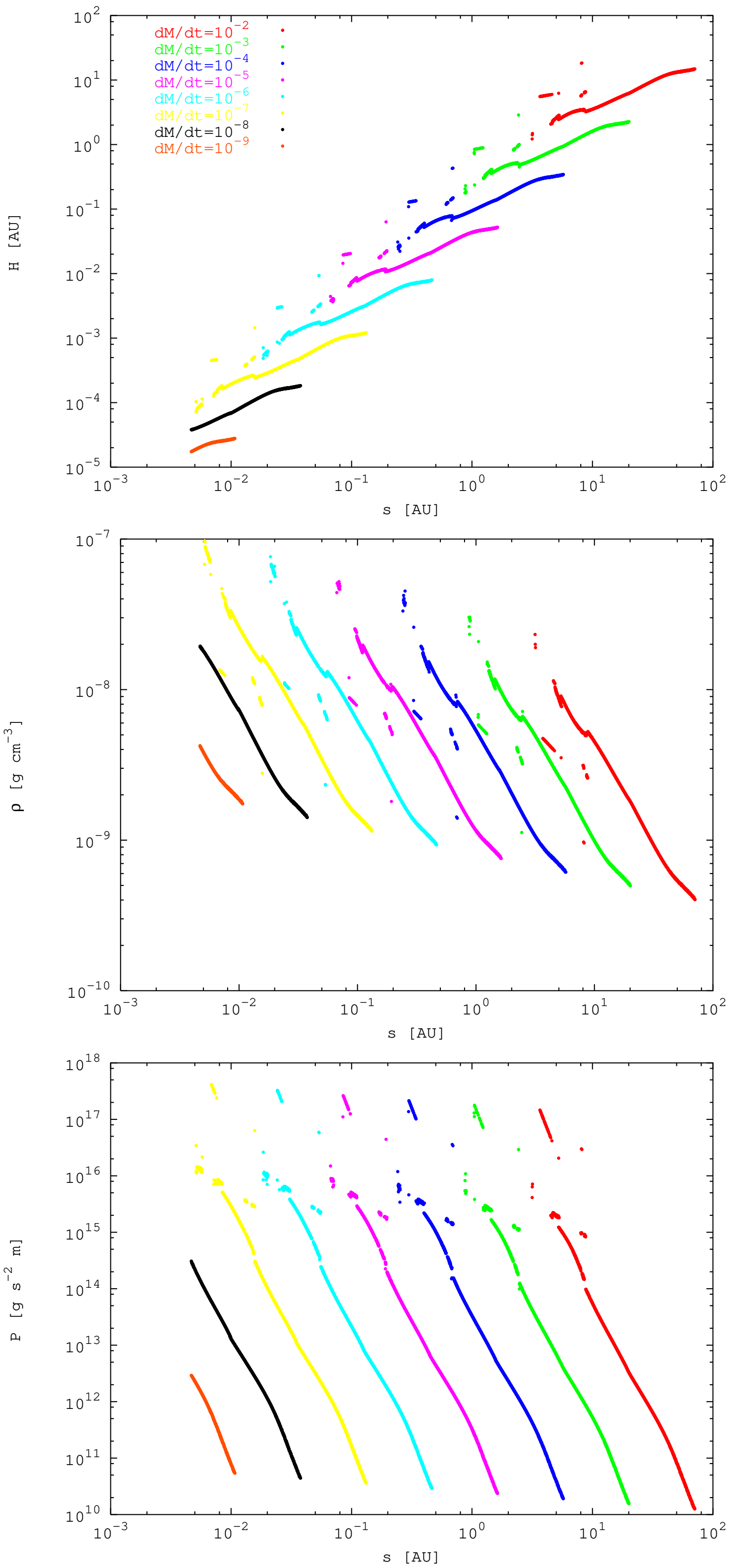


Abbildung 4.2: Die Größen H, ρ und P

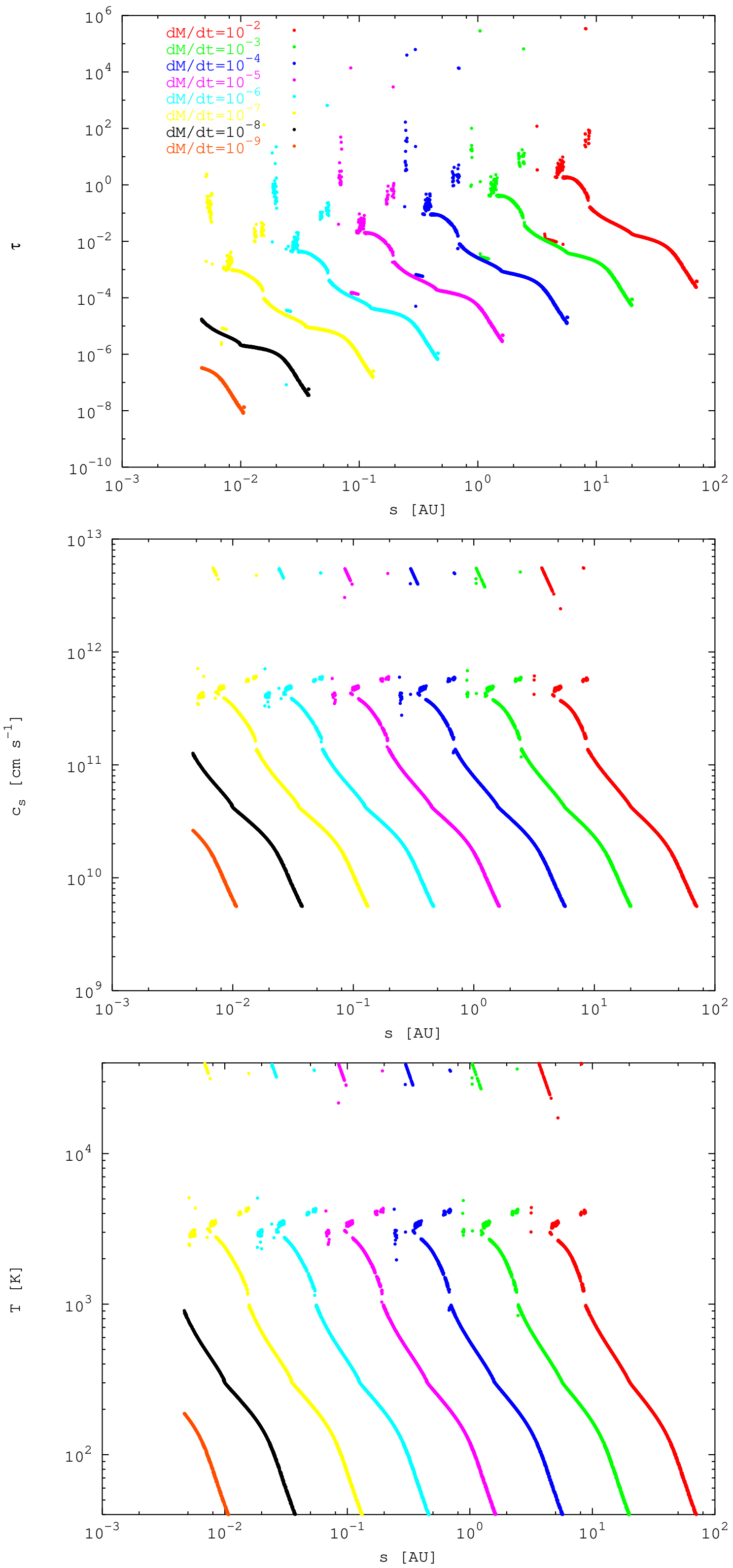


Abbildung 4.3: Die Größen τ, c_s und T

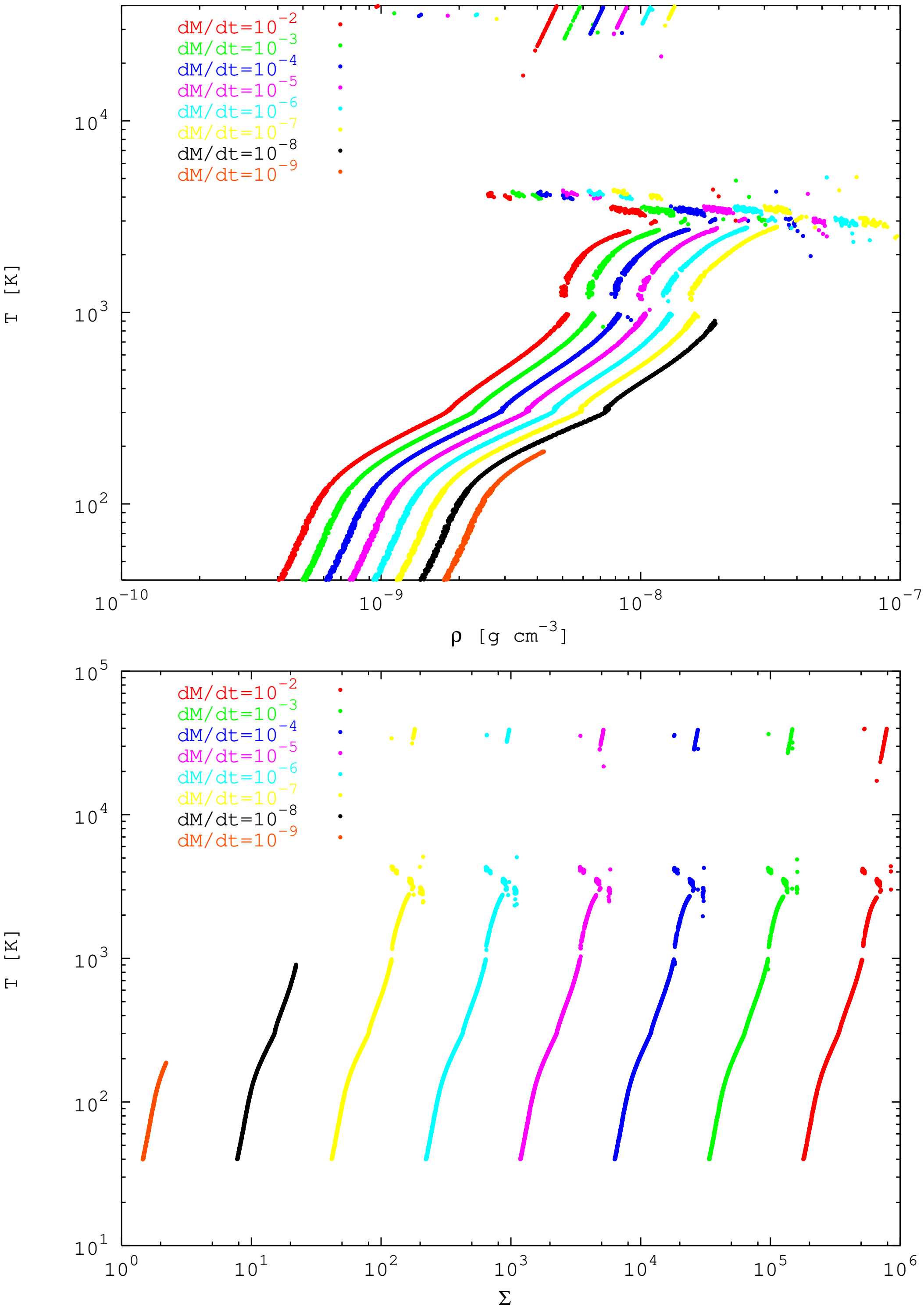


Abbildung 4.4: $\rho - T$ und $\Sigma - T$

- Eine vorwiegend durch gebunden-frei-Übergänge von H^- getriebene Instabilität im Temperaturbereich zwischen 4 000 und 20 000 K
- Im Bereich um 1000 K eine durch CIA erzeugte Instabilität

Als Referenz siehe Abb. 4.4 und 3.6-3.8.

Die Randbedingungen des Modells sind unterschiedlich gut erfüllt: Die Scheiben

- sind geometrisch dünn, wie gefordert ($\frac{h}{s} \leq 0.1$)
- aber auch optisch dünn ($\tau \approx 10^{-8} \ldots 10^{2}$)

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Diplomarbeit ging es darum, ein erstes einfaches Modell von primordialen Akkretionsscheiben zu gewinnen, um sich einen Eindruck über die wichtigsten Scheibenparameter zu verschaffen. Es wurde das Modell einer stationären, geometrisch dünnen, optisch dicken Scheibe verwendet.

Da zur Modellierung immer auch Materialfunktionen nötig sind, wurde im Rahmen dieser Arbeit hauptsächlich die Berechnung einer Opazität für primordiale Mischungen vorgenommen. Berechnungen für $Z = 0$-Opazitäten existieren zwar schon ([Len91] für T = 1000…7000 K und OPAL für T> 10^4 K), doch haben die letzten 10-15 Jahre einige Erfolge im Verständnis insbesondere der Kollisionsinduzierten Absorptionen gebracht, sodaß nunmehr eine verbesserte Modellierung möglich ist. Zudem konnte mit den berechneten Opazitäten erstmals auch in den Bereich von Temperaturen unter 1000 K vorgestoßen werden. Der große Vorteil von primordialer Materie liegt gerade darin, keine reichhaltige Molekülchemie auszubilden, welche eine realistische Modellierung für $Z > 0$ unterhalb von $\approx$ 4000 K unmöglich macht.

Als Ergebnis liegen nun Opazitäten für primordiale Mischungen vor, die einen Temperaturbereich von 40 - 40 000 K und einen Dichtebereich von $10^{-20} \ldots 10^{-2}$ g cm^{-3} überdecken. Desweiteren wurde zum ersten Mal die Auswirkung von Lithium und Deuterium auf die Opazitäten untersucht.

Lithium fällt zwar nicht durch eigene Absorptionsfeatures auf (dazu ist die relative Häufigkeit zu gering), allerdings wird Lithium als Mitglied der Alkali-Metalle schon bei sehr niedrigen Temperaturen ionisiert und liefert damit freie Elektronen, welche einerseits früh Thomson-Streuung machen, andererseits aber das Gleichgewicht von $H^- \leftrightarrow H + e^-$ schon bei niedrigen Temperaturen zugunsten von H^- verschieben. Der größte Effekt ist in einem Temperaturstreifen von 600 - 4 000 K und erreicht bei kleinen Dichten Werte bis zu einem Faktor 100, bei größeren Dichten Werte bis ca. 50 %. Lithium ist damit als indirekter Absorber nicht zu vernachlässigen.

Deuterium hat keine nennenswerte Effekte auf die Opazität, einziger Effekt könnte CIA zwischen HD/He, HD/H2 … werden. In diesem Gebiet ist die Theorie allerdings noch nicht so weit, um hier vernünftige Abschätzungen zu machen.

Die Modellierung stationärer, geometrisch dünner, optisch dicker primordialer Scheiben hat gezeigt, daß die Scheiben zwar geometrisch dünn, aber auch optisch dünn. Daher müssen zwingend als nächstes Planck-Mittel berechnet werden, um den optisch dünnen Fall modellieren zu können. Weiterhin sind die vorliegenden Opazitäten nur von 40 - 40 000 K gültig. Um auch die höheren Temperaturen im Innenbereich der Scheibe zu modellieren, müssen in diesem Bereich OPAL-Opazitäten eingefügt werden (Z=0). In diesem Bereich sollten Lithium-Effekte keine Rolle mehr spielen. Falls die Dichten und Temperaturen im Zentralbereich genügend hoch sind, könnten evtentuell die ersten Akkretionsscheiben schon zur chemischen Anreicherung der interstellaren Materie beitragen.

Weiterhin muß überprüft werden, ob die Annahme des chemischen Gleichgewichts in der Scheibe gerechtfertig ist. Insbesondere ist die H_2-Bildung in primordialer Materie nur bei hohen Dichten halbwegs effektiv, wohingegen sie in $Z > 0$-Materie aufgrund der Katalyse an Staub sehr schnell und effektiv abläuft. Man muß also analysieren, auf welchen Zeitskalen die Chemie ins Gleichgewicht läuft und diese mit der viskosen Zeitskala vergleichen. Erste Versuche mit Ratennetzwerken existieren und sollen in Zukunft komplettiert werden.

Das mittlere Molekulargewicht wurde hier global $\mu \approx 0.6$ gesetzt, was für vollständig ionisiertes Gas richtig ist, aber bei teilweiser Ionisation bis zu einem Faktor 4 falsch ist.

Die Rolle von Selbstgravitation wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht berücksichtigt, wird aber auf jeden Fall bei großem Abstand zum Zentralobjekt eine große Rolle spielen.

Die stationären primordialen Scheiben weisen einige interessante Instabilitäten auf (H^- bei $\approx 10^4$ K, CIA bei $\approx 10^3$ K).

In der vorliegenden Arbeit wurden nun zunächst einmal realistische Opazitäten berechnet und erste Modelle primordialer Scheiben gerechnet. Damit hat man einen gewissen Eindruck über Grundparameter dieser Objekte und kann damit eine realistischere Modellierung angehen.

Anhang A

Zustandssummen

A.1 HD

Die Zustandssumme von HD wurde mit den Ernergieniveaus aus [Rou99] und einer Dissoziationsenergie von 4.511 eV = 36380 cm^{-1} berechnet. Die Zustandssumme von $x_3 = [H]$ wurde nach Sauval und Tatum berechnet, unterhalb von 1000 K identisch 2 gesetzt. Die Zustandsfunktionen von $x_2 = [H^-]$, $x_4 = [H^+]$, $x_7 = [He]$, $x_8 = [He^+]$ und $x_9 = [He^{++}]$ wurden durch das statistische Gewicht des Grundzustands approximiert. (Was im betrachteten Temperaturbereich nur Fehler von wenigen Promille ergibt)

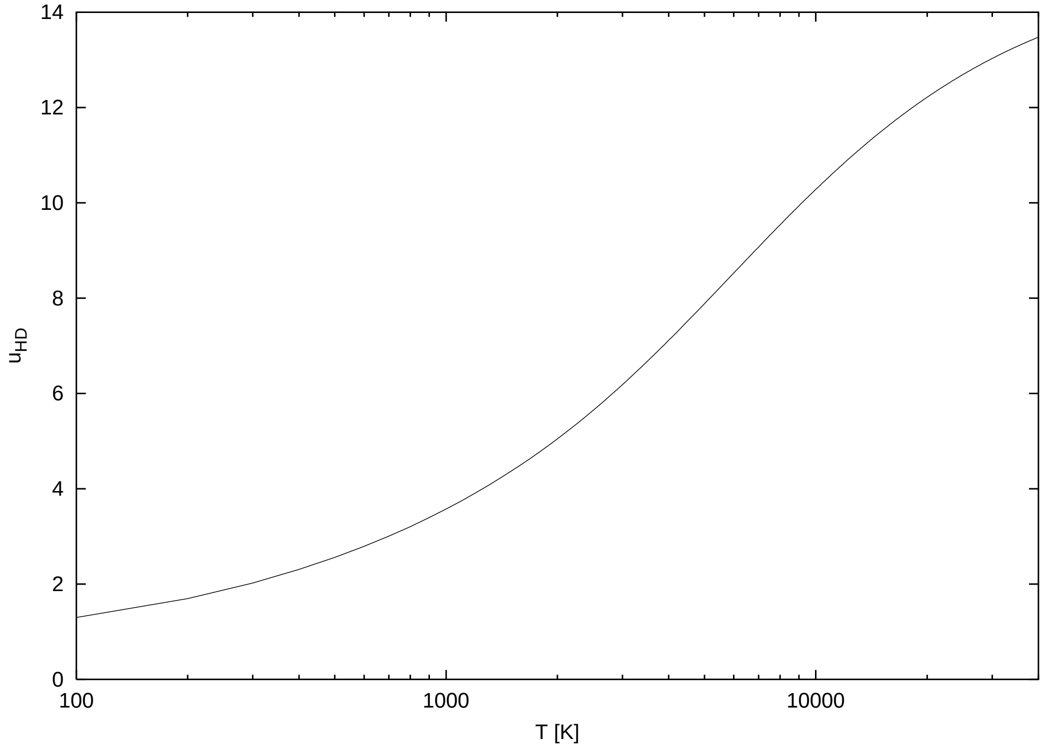


Abbildung A.1: Zustandssumme von HD

Anhang B

Gleichgewichtskonstanten

B.1 Gefittete Gleichgewichtskonstanten

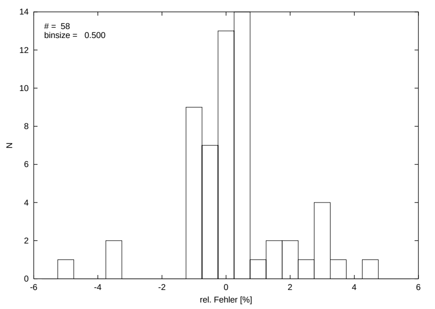
K_6

$$H_2^+ \leftrightarrow H^+ + H$$

$$^pK(T) = 10^{a+bT_3+\frac{c}{T_3}+\frac{d}{T_3^2}}$$

$a = (10.7297 \pm 0.0088)$
$b = (3.802 \pm 0.036)^{-2}$
$c = -(12.957 \pm 0.051)$
$d = -(1.137 \pm 0.069)$

$\Delta = 1.75\%$, $1500 - 25200$ K, [Sta94b]



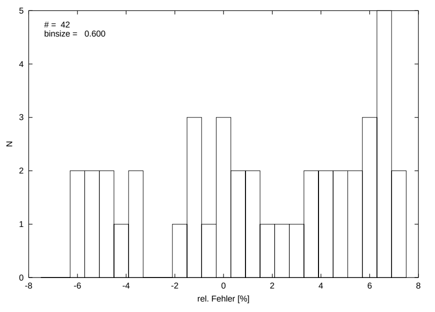
K_{10}

$$He_2^+ \leftrightarrow He^+ + He$$

$$^pK(T) = 10^{a+bT_3+\frac{c}{T_3}+\frac{d}{T_3^2}}$$

$a = (11.1899 \pm 0.0128)$
$b = (3.038 \pm 0.042)^{-2}$
$c = -(12.603 \pm 0.056)$
$d = 0$

$\Delta = 4.63\%$, $2000 - 70000$ K, [Sta94b]



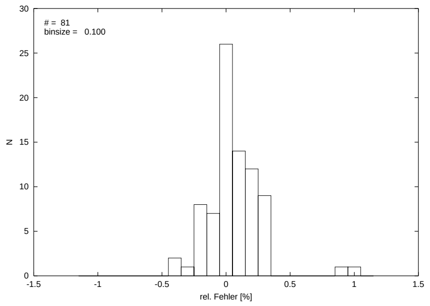
$K_{13,1}$

$$LiH \leftrightarrow Li + H$$

$$^{n}K(T) = 10^{\sum_{i=1}^{10} c_i (\log_{10} T_3)^{i-1}}$$

$c_1 = (10.9965 \pm 0.0003)$	$c_6 = (9.4825 \pm 0.0098)$
$c_2 = (28.4066 \pm 0.0014)$	$c_7 = -(2.3948 \pm 0.0099)$
$c_3 = -(33.6871 \pm 0.0042)$	$c_8 = (7.3466 \pm 0.069)^{-1}$
$c_4 = (27.204 \pm 0.006)$	$c_9 = -(3.286 \pm 0.031)^{-1}$
$c_5 = -(18.4031 \pm 0.0109)$	$c_{10} = (8.206 \pm 0.18)^{-2}$

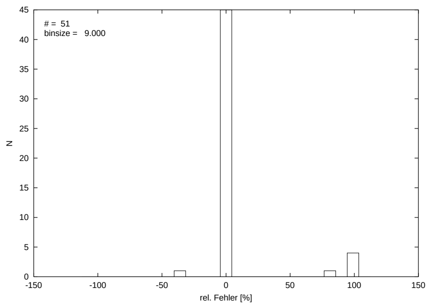
$\Delta = 0.251\%$, $50 - 40000$ K, [Sta96]



$$^{n}K(T) = 10^{a+bT_2+\frac{c}{T_2}+\frac{d}{T_2^2}+\frac{e}{T_2^3}}$$

$a = (23.448 \pm 0.048)$
$b = -(4.82 \pm 1.12)^{-2}$
$c = -(12.301 \pm 0.031)$
$d = -(1.322 \pm 0.038)^{-1}$
$e = (3.093 \pm 0.127)^{-3}$

$\Delta = 30.4\%$, $50 - 40000$ K, [Sta96]



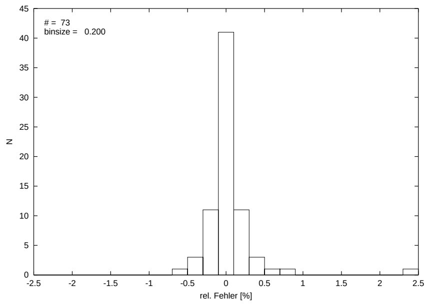
$K_{13,2}$

$$LiH \leftrightarrow LiH^+ + e^-$$

$$^{n}K(T) = 10^{\sum_{i=1}^{10} c_i (\log_{10} T_3)^{i-1}}$$

$c_1 = -(18.1716 \pm 0.00055)$	$c_6 = (20.467 \pm 0.044)$
$c_2 = (90.3191 \pm 0.0027)$	$c_7 = -(7.645 \pm 0.033)$
$c_3 = -(104.21 \pm 0.0093)$	$c_8 = (2.926 \pm 0.037)$
$c_4 = (79.0549 \pm 0.0193)$	$c_9 = -(1.1359 \pm 0.0122)$
$c_5 = -(44.9955 \pm 0.0301)$	$c_{10} = (2.258 \pm 0.083)^{-1}$

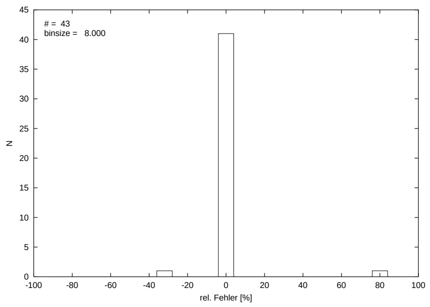
$\Delta = 0.400\%$, $130 - 40000$ K, [Sta96]



$$^{n}K(T) = 10^{a+bT_2+\frac{c}{T_2}+\frac{d}{T_2^2}+\frac{e}{T_2^3}}$$

$a = (21.1577 \pm 0.0177)$
$b = -(4.63 \pm 0.27)^{-2}$
$c = -(39.344 \pm 0.020)$
$d = (4.73 \pm 0.52)^{-2}$
$e = -(1.48 \pm 0.50)^{-3}$

$\Delta = 13.7\%$, $130 - 40000$ K, [Sta96]



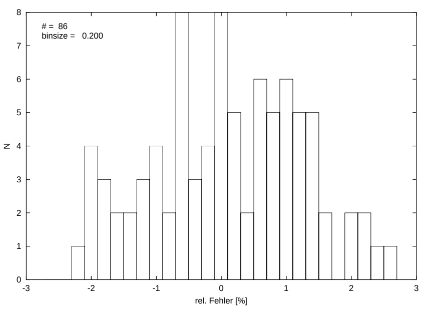
$K_{14,1}$

$$LiH^+ \leftrightarrow Li^+ + H$$

$$^nK(T) = 10^{\sum_{i=1}^{10} c_i(\log_{10} T_3)^{i-1}}$$

$c_1 = (21.7759 \pm 0.0013)$	$c_6 = (6.219 \pm 0.098)^{-1}$
$c_2 = (2.2925 \pm 0.0050)$	$c_7 = (4.48 \pm 1.07)^{-2}$
$c_3 = -(1.292 \pm 0.011)$	$c_8 = (4.12 \pm 0.33)^{-2}$
$c_4 = (2.019 \pm 0.012)$	$c_9 = -(4.47 \pm 0.20)^{-2}$
$c_5 = -(1.893 \pm 0.019)$	$c_{10} = (3.62 \pm 0.54)^{-3}$

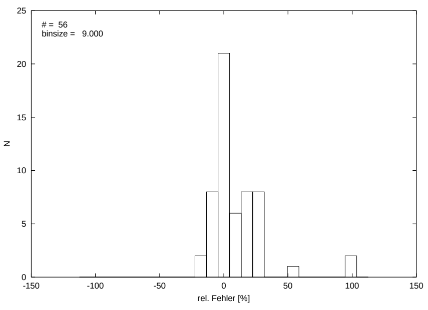
$\Delta = 1.25\%$, 140 – 40000 K, [Sta96]



$$^nK(T) = 10^{a+bT_2+\frac{c}{T_2}+\frac{d}{T_2^2}+\frac{e}{T_2^3}}$$

$a = (22.605 \pm 0.031)$
$b = (1.117 \pm 0.079)^{-2}$
$c = -(8.794 \pm 0.087)$
$d = -(2.59 \pm 0.40)^{-1}$
$e = (1.247 \pm 0.143)^{-2}$

$\Delta = 25.4\%$, 140 – 40000 K, [Sta96]



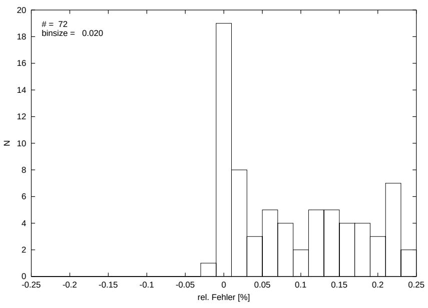
$K_{14,2}$

$$LiH^+ \leftrightarrow Li + H^+$$

$$^nK(T) = 10^{\sum_{i=1}^{10} c_i(\log_{10} T_3)^{i-1}}$$

$c_1 = -(19.6505 \pm 0.000041)$	$c_6 = (25.5972 \pm 0.0036)$
$c_2 = (97.7454 \pm 0.0002)$	$c_7 = -(9.0200 \pm 0.0042)$
$c_3 = -(111.428 \pm 0.00079)$	$c_8 = (2.8046 \pm 0.0032)$
$c_4 = (87.5086 \pm 0.0016)$	$c_9 = -(0.6057 \pm 0.0023)$
$c_5 = -(53.2494 \pm 0.0030)$	$c_{10} = (6.477 \pm 0.127)^{-2}$

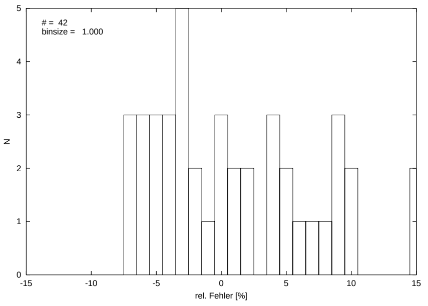
$\Delta = 0.121\%$, 5 – 40000 K, [Sta96]



$$^nK(T) = 10^{a+bT_2+\frac{c}{T_2}+\frac{d}{T_2^2}+\frac{e}{T_2^3}}$$

$a = (22.379 \pm 0.026)$
$b = (1.612 \pm 0.035)^{-2}$
$c = -(420.40 \pm 0.31)$
$d = -(11.92 \pm 0.85)$
$e = (1.53 \pm 0.87)$

$\Delta = 6.48\%$, 5 – 40000 K, [Sta96]



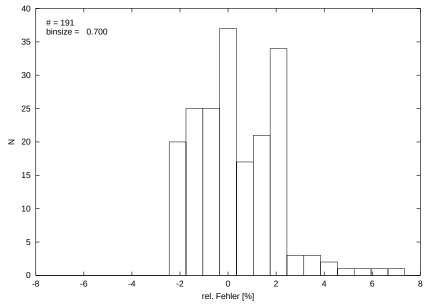
K_{20}

$$Li_2 \leftrightarrow Li + Li$$

$$^{p}K(T) = 10^{a+bT_3+cT_3^2+\frac{d}{T_3}}$$

$a = -(1.8936 \pm 0.0112)$
$b = (6.57 \pm 0.34)^{-2}$
$c = (2.15 \pm 0.28)^{-3}$
$d = -(8.676 \pm 0.101)^{-1}$

$\Delta = 2.00\%$, 1000 − 9000 K, Refit an [Sau84]



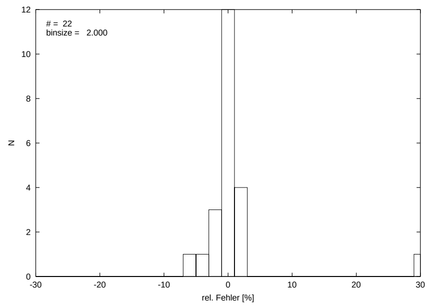
K_{18}

$$H_2 + H_2^+ \leftrightarrow H_3^+ + H$$

$$^{n}K(T) = 10^{a+\frac{b}{T_2}+\frac{c}{T_2^2}+\frac{d}{T_2^3}+eT_2}$$

$a = -(5.24 \pm 0.40)^{-1}$
$b = (78.479 \pm 0.099)$
$c = -(2.44 \pm 0.78)^{-1}$
$d = (2.26 \pm 1.26)^{-2}$
$e = -(1.33 \pm 0.29)^{-2}$

$\Delta = 6.88\%$, 30 − 1800 K, [Sid92]



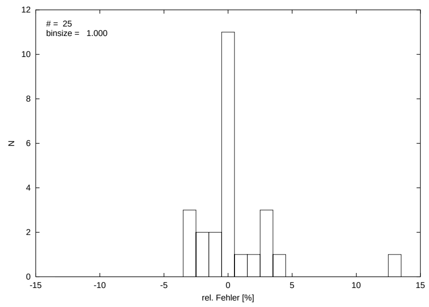
$K_{18,15}$

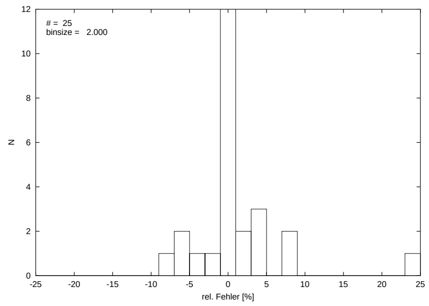
$$H_3^+ + D \leftrightarrow H_2D^+ + H$$

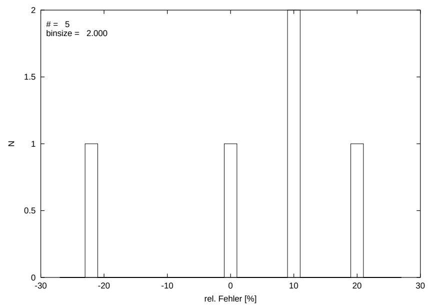
$$^{n}K(T) = 10^{a+\frac{b}{T_2}+\frac{c}{T_2^2}+\frac{d}{T_2^3}+eT_2}$$

$a = (3.149 \pm 0.098)^{-1}$
$b = (2.1987 \pm 0.0078)$
$c = (4.367 \pm 0.120)^{-2}$
$d = -(1.277 \pm 0.043)^{-3}$
$e = (5.17 \pm 0.91)^{-3}$

$\Delta = 3.32\%$, 5 − 1800 K, [Sid92]



$K_{18,17}$ $H_3^+ + HD \leftrightarrow H_2D^+ + H_2$	
$^nK(T) = 10^{a+\frac{b}{T_2}+\frac{c}{T_2^2}+\frac{d}{T_2^3}+eT_2}$	
$a = (1.258 \pm 0.197)^{-1}$ $b = (4.819 \pm 0.157)^{-1}$ $c = (5.65 \pm 0.24)^{-2}$ $d = -(1.669 \pm 0.087)^{-3}$ $e = (2.14 \pm 1.83)^{-3}$	
$\Delta = 6.53\%$, $5 - 1800$ K, [Sid92]	

K_5 $H_2 \leftrightarrow H + H$	
$^pK(T) = 10^{a+\frac{b}{T_4}}$	
$a = (12.407 \pm 0.057)$ $b = (-2.23733 \pm 0.00130)$	
$\Delta = 15.56\%$, $1000 - 15000$ K, [Var65a]	

Als Qualitätsmaß der Fits wurde die dimensionslose Größe

$$\Delta = 100 \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - f(x_i))^2}{y_i}} \quad \% \tag{B.1}$$

definiert.

($(x \pm y)^a$ bedeutet $(x \pm y) \cdot 10^a$, $T_n = \frac{T}{10^n \text{ K}}$)

B.2 Sahafunktionen

Für die nicht unter B.1 aufgeführten Gleichgewichtskonstanten wurde ein Saha-Ansatz nach Gl. 3.4 gewählt.

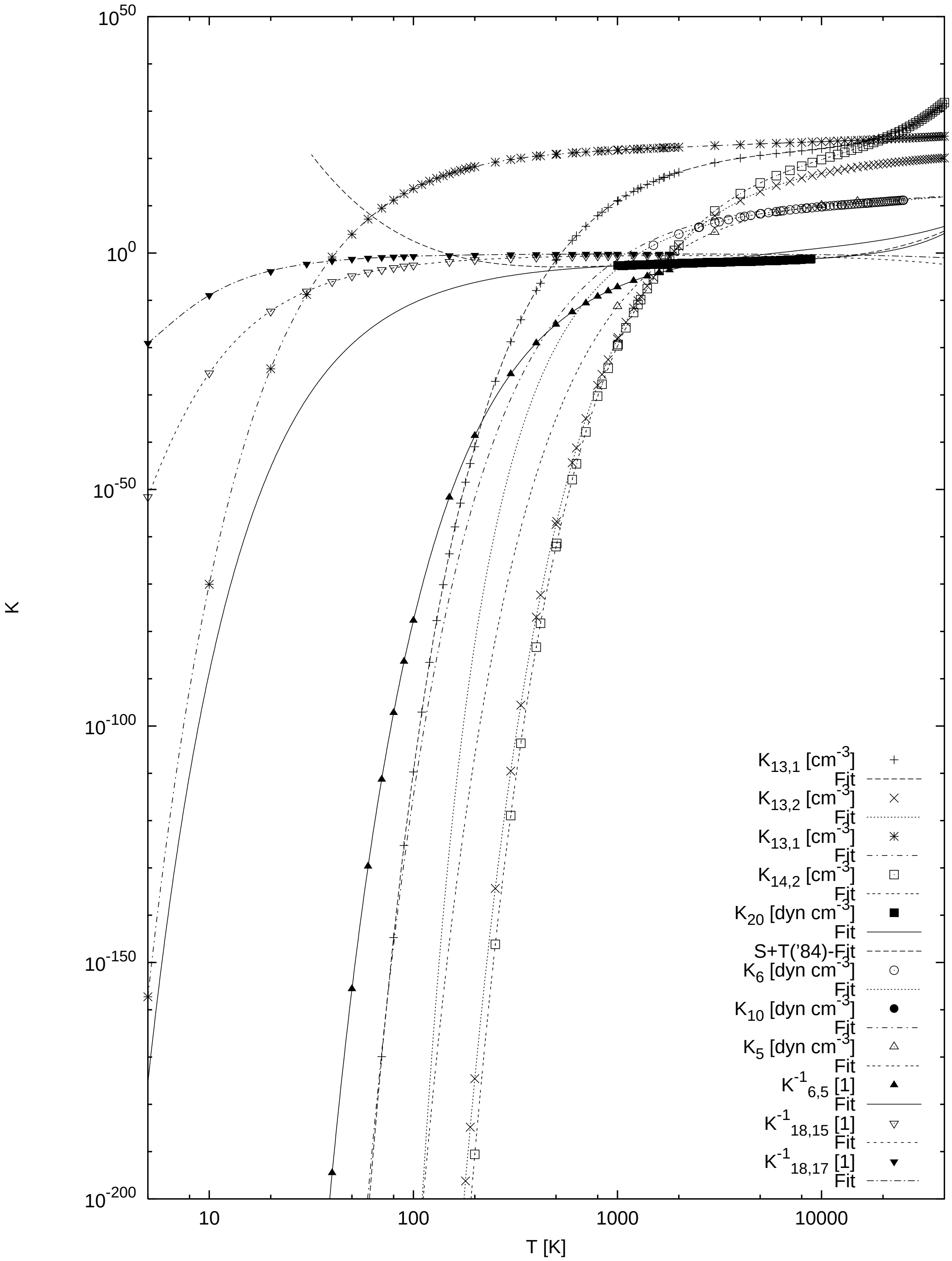


Abbildung B.1: Übersicht über alle gefitteten Gleichgewichtskonstanten

		g_1	g_2	g_3	χ [eV]
K_2	$H^- \leftrightarrow H + e^-$	1	p	2	0.747
K_3	$H \leftrightarrow H^+ + e^-$	p	1	2	13.598
K_7	$He \leftrightarrow He^+ + e^-$	1	2	2	24.587
K_8	$He^+ \leftrightarrow He^{++} + e^-$	2	1	2	54.418
K_{12}	$Li^{++} \leftrightarrow Li^+ + e^-$	1	2	2	75.640
K_{17}	$HD \leftrightarrow H + D$	c	2	2	4.511

B.3 Zusammenfassung

K_2	$H^- \leftrightarrow H + e^-$	Saha ($\chi = 0.747$ eV)	n
K_3	$H \leftrightarrow H^+ + e^-$	Saha ($\chi = 13.598$ eV)	n
K_5	$H_2 \leftrightarrow H + H$	$1000 - 15000K$, [Var65a]	p
K_6	$H_2^+ \leftrightarrow H^+ + H$	1500 – 25200 K, [Sta94b]	p
K_7	$He \leftrightarrow He^+ + e^-$	Saha ($\chi = 24.587$ eV)	p
K_8	$He^+ \leftrightarrow He^{++} + e^-$	Saha ($\chi = 54.418$ eV)	n
K_{10}	$He_2^+ \leftrightarrow He^+ + He$	2000 – 70000 K, [Sta94b]	p
K_{12}	$Li^{++} \leftrightarrow Li^+ + e^-$	Saha ($\chi = 75.640$ eV)	n
$K_{13,1}$	$LiH \leftrightarrow Li + H$	50 – 40000 K, [Sta96]	n
$K_{13,2}$	$LiH \leftrightarrow LiH^+ + e^-$	130 – 40000 K, [Sta96]	n
$K_{14,1}$	$LiH^+ \leftrightarrow Li^+ + H$	5 – 40000 K, [Sta96]	n
$K_{14,2}$	$LiH^+ \leftrightarrow Li + H^+$	140 – 40000 K, [Sta96]	n
K_{15}	$D \leftrightarrow D^+ + e^-$	Saha, $K_{15} = K_3$ angenommen	n
K_{17}	$HD \leftrightarrow D + H$	Saha ($\chi = 4.511$ eV)	n
K_{18}	$H_3^+ + H \leftrightarrow H_2^+ + H_2$	30 – 1800 K, [Sid92]	n
$K_{18,15}$	$H_3^+ + D \leftrightarrow H_2D^+ + H$	5 – 1800 K, [Sid92]	n
$K_{18,17}$	$H_3^+ + HD \leftrightarrow H_2D^+ + H_2$	5 – 1800 K, [Sid92]	n
K_{20}	$Li_2 \leftrightarrow Li + Li$	1000 – 16000 K Refit an [Sau84]	p
K_{22}	$D_2 \leftrightarrow D + D$	$4 \cdot 10^{-5} K_5$ assumed	p

Anhang C

Absorptionskoeffizienten

$$P_n^a(x) = \sum_{i=0}^{n} a_n x^n \qquad G_n^a(x) = a_0 \log_{10} x + \sum_{i=0}^{n} a_{n+1} x^n$$

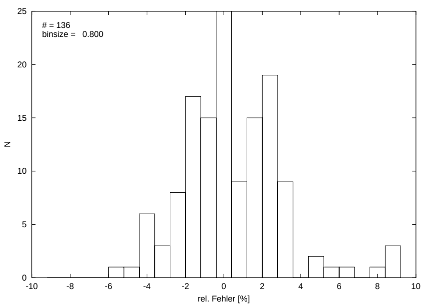
$\sigma_{He^-}^{ff}$

$$He + e^- + h\nu \rightarrow He + e^-$$

$$\sigma_{He^-}^{ff}(\nu, T) = P_3^a(T_4)\nu_4^{-2} + P_3^b(T_4)\nu_4^c$$

$a_0 = (49.71 \pm 0.75)$	$b_0 = (0.0426 \pm 0.0109)$
$a_1 = (-135.27 \pm 5.07)$	$b_1 = (-0.153 \pm 0.041)$
$a_2 = (184.35 \pm 9.97)$	$b_2 = (0.220 \pm 0.062)$
$a_3 = (-86.36 \pm 5.67)$	$b_3 = (-0.106 \pm 0.031)$
$c = (0.323 \pm 0.084)$	

$\Delta = 2.88\%$



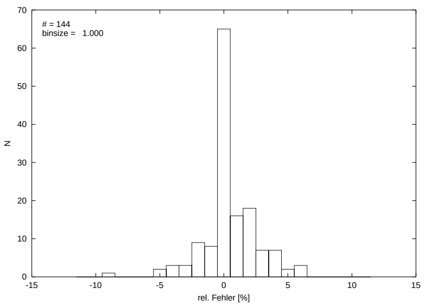
$\sigma_{H_2^-}^{ff}$

$$H_2 + e^- + h\nu \rightarrow H_2 + e^-$$

$$\sigma_{H_2^-}^{ff}(\nu, T) = P_4^a(T_4)\nu_4^{-2} + P_4^b(T_4)\nu_4^c$$

$a_0 = (70.49 \pm 4.36)$	$b_0 = (9.92 \pm 0.89)$
$a_1 = (-96.93 \pm 45.18)$	$b_1 = (-61.06 \pm 6.21)$
$a_2 = (201 \pm 158)$	$b_2 = (151.0 \pm 17.7)$
$a_3 = (-238 \pm 220)$	$b_3 = (-166 \pm 22)$
$a_4 = (101 \pm 102)$	$b_4 = (66.4 \pm 9.7)$
$c = (-0.905 \pm 0.027)$	

$\Delta = 2.40\%$



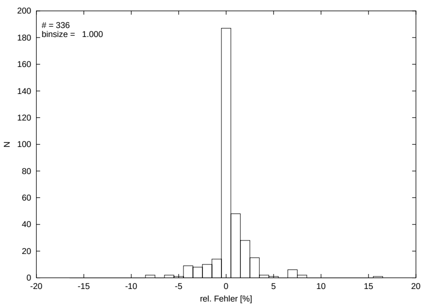
$\sigma^{diss}_{He_2^+}$

$$He_2^+ + h\nu \rightarrow He^+ + He$$

$$\sigma^{diss}_{He_2^+}(\nu,T) = 10^{G_4^a(\nu_5) + \frac{G_4^b(\nu_5)}{T_4} + G_4^c(\nu_5)T_4 + \frac{G_4^d(\nu_5)}{T_4^2}}$$

$a_0 = (8.53 \pm 0.40)^{-1}$	$b_0 = (3.3 \pm 4.9)^{-2}$
$a_1 = (1.227 \pm 0.075)$	$b_1 = -(2.10 \pm 0.93)^{-1}$
$a_2 = -(2.22 \pm 0.31)$	$b_2 = (8.09 \pm 3.92)^{-1}$
$a_3 = (1.83 \pm 0.62)$	$b_3 = (1.00 \pm 0.72)$
$a_4 = -(2.38 \pm 0.73)$	$b_4 = -(2.50 \pm 0.65)$
$a_5 = (1.86 \pm 0.50)$	$b_5 = (1.36 \pm 0.30)$
$a_6 = -(6.12 \pm 1.42)^{-1}$	$b_6 = -(2.34 \pm 0.62)^{-1}$
$c_0 = (3.2 \pm 7.3)^{-3}$	$d_0 = -(1.30 \pm 1.52)^{-2}$
$c_1 = (0.71 \pm 1.37)^{-2}$	$d_1 = -(1.48 \pm 0.29)^{-1}$
$c_2 = -(5.4 \pm 5.5)^{-2}$	$d_2 = (2.85 \pm 1.19)^{-1}$
$c_3 = (2.02 \pm 0.93)^{-1}$	$d_3 = -(1.15 \pm 2.03)^{-1}$
$c_4 = -(2.84 \pm 0.81)^{-1}$	$d_4 = -(1.28 \pm 1.41)^{-1}$
$c_5 = (1.69 \pm 0.48)^{-1}$	$d_5 = (0.86 \pm 0.62)^{-1}$
$c_6 = -(3.65 \pm 1.32)^{-2}$	$d_6 = -(1.05 \pm 2.92)^{-1}$

$\Delta = 2.36\%$



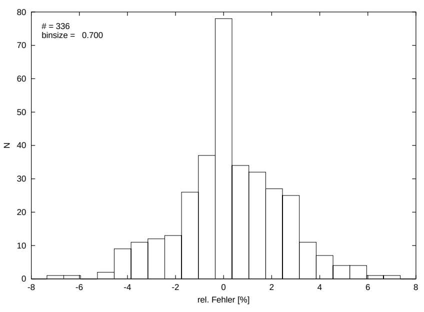
$\sigma^{diss}_{H_2^+}$

$$H_2^+ + h\nu \rightarrow H^+ + H$$

$$\sigma^{diss}_{He_2^+}(\nu,T) = 10^{G_4^a(\nu_5) + \frac{G_4^b(\nu_5)}{T_4} + G_4^c(\nu_5)T_4 + \frac{G_4^d(\nu_5)}{T_4^2}}$$

$a_0 = (7.64 \pm 0.48)^{-1}$	$b_0 = (3.76 \pm 3.56)^{-2}$
$a_1 = (7.60 \pm 0.41)^{-1}$	$b_1 = -(3.76 \pm 0.29)^{-1}$
$a_2 = -(2.03 \pm 0.27)^{-1}$	$b_2 = (7.97 \pm 1.79)^{-2}$
$a_3 = -(3.93 \pm 3.41)^{-3}$	$b_3 = (1.355 \pm 0.167)^{-2}$
$a_4 = (1.368 \pm 0.218)^{-3}$	$b_4 = -(2.024 \pm 0.078)^{-3}$
$a_5 = -(6.26 \pm 0.58)^{-5}$	$b_5 = (5.73 \pm 0.31)^{-5}$
$c_0 = (3.34 \pm 16.73)^{-3}$	$d_0 = -(1.99 \pm 0.75)^{-2}$
$c_1 = -(2.51 \pm 1.45)^{-2}$	$d_1 = -(1.368 \pm 0.062)^{-1}$
$c_2 = -(9.10 \pm 10.28)^{-3}$	$d_2 = (3.60 \pm 0.38)^{-2}$
$c_3 = (3.98078 \pm 1.44)^{-3}$	$d_3 = -(4.82 \pm 0.44)^{-3}$
$c_4 = -(3.60 \pm 0.93)^{-4}$	$d_4 = (2.98 \pm 0.37)^{-4}$
$c_5 = (9.00 \pm 2.15)^{-6}$	$d_5 = -(6.39 \pm 1.50)^{-6}$

$\Delta = 2.42\%$



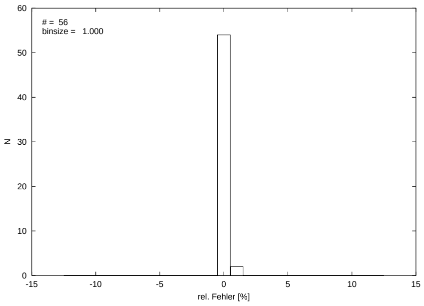
$\sigma^{ff}_{H^{+}+H}$

$$H^{+} + H + h\nu \rightarrow H^{+} + H$$

$$\sigma^{ff}_{H^{+}+H}(\nu, T) = P^{a_{ij}}_{4,2}(\log_{10}\nu_5, \log_{10} T_4)$$

$a_{00} = (6.7046 \pm 0.0.0174)^{-1}$	$a_{30} = -(1.926 \pm 0.115)^{-1}$
$a_{01} = -(3.934 \pm 0.0.048)^{-1}$	$a_{31} = -(1.39 \pm 0.32)^{-1}$
$a_{02} = (3.472 \pm 0.0.151)^{-1}$	$a_{32} = (1.81 \pm 1.00)^{-1}$
$a_{10} = -(1.2116 \pm 0.0047)$	$a_{40} = (5.63 \pm 0.64)^{-2}$
$a_{11} = (3.461 \pm 0.128)^{-1}$	$a_{41} = -(9.4 \pm 1.7)^{-2}$
$a_{12} = -(3.88 \pm 0.41)^{-1}$	$a_{42} = (8.8 \pm 5.5)^{-2}$
$a_{20} = (7.004 \pm 0.063)^{-1}$	
$a_{21} = (2.49 \pm 0.18)^{-1}$	
$a_{22} = -(1.67 \pm 0.55)^{-1}$	

$\Delta = 0.26\%$, $\nu < 10^5$ cm^{-1}



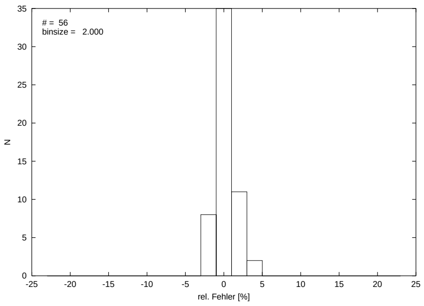
$\sigma^{ff}_{He^{+}+He}$

$$He^{+} + He + h\nu \rightarrow He^{+} + He$$

$$\sigma^{ff}_{He^{+}+He}(\nu, T) = P^{a_{ij}}_{4,2}(\log_{10}\nu_5, \log_{10} T_4)$$

$a_{00} = (1.3676 \pm 0.0138)^{-1}$	$a_{30} = -(4.07 \pm 0.79)^{-2}$
$a_{01} = -(8.34 \pm 0.35)^{-2}$	$a_{31} = -(1.35 \pm 1.97)^{-2}$
$a_{02} = (5.48 \pm 0.90)^{-2}$	$a_{32} = (1.64 \pm 5.2)^{-2}$
$a_{10} = -(2.137 \pm 0.037)^{-1}$	$a_{40} = (2.9 \pm 4.7)^{-3}$
$a_{11} = (5.24 \pm 0.95)^{-2}$	$a_{41} = -(1.424 \pm 1.211)^{-2}$
$a_{12} = -(4.25 \pm 2.43)^{-2}$	$a_{42} = (1.14 \pm 3.03)^{-2}$
$a_{20} = (1.223 \pm 0.045)^{-1}$	
$a_{21} = (5.46 \pm 1.15)^{-2}$	
$a_{22} = -(3.17 \pm 2.96)^{-2}$	

$\Delta = 2.03\%$, $\nu < 10^5$ cm^{-1}



($(x \pm y)^a$ bedeutet $(x \pm y) \cdot 10^a$, $T_n = \frac{T}{10^n\ \mathrm{K}}$, $\nu_n = \frac{\nu}{10^n\ \mathrm{cm}^{-1}}$)

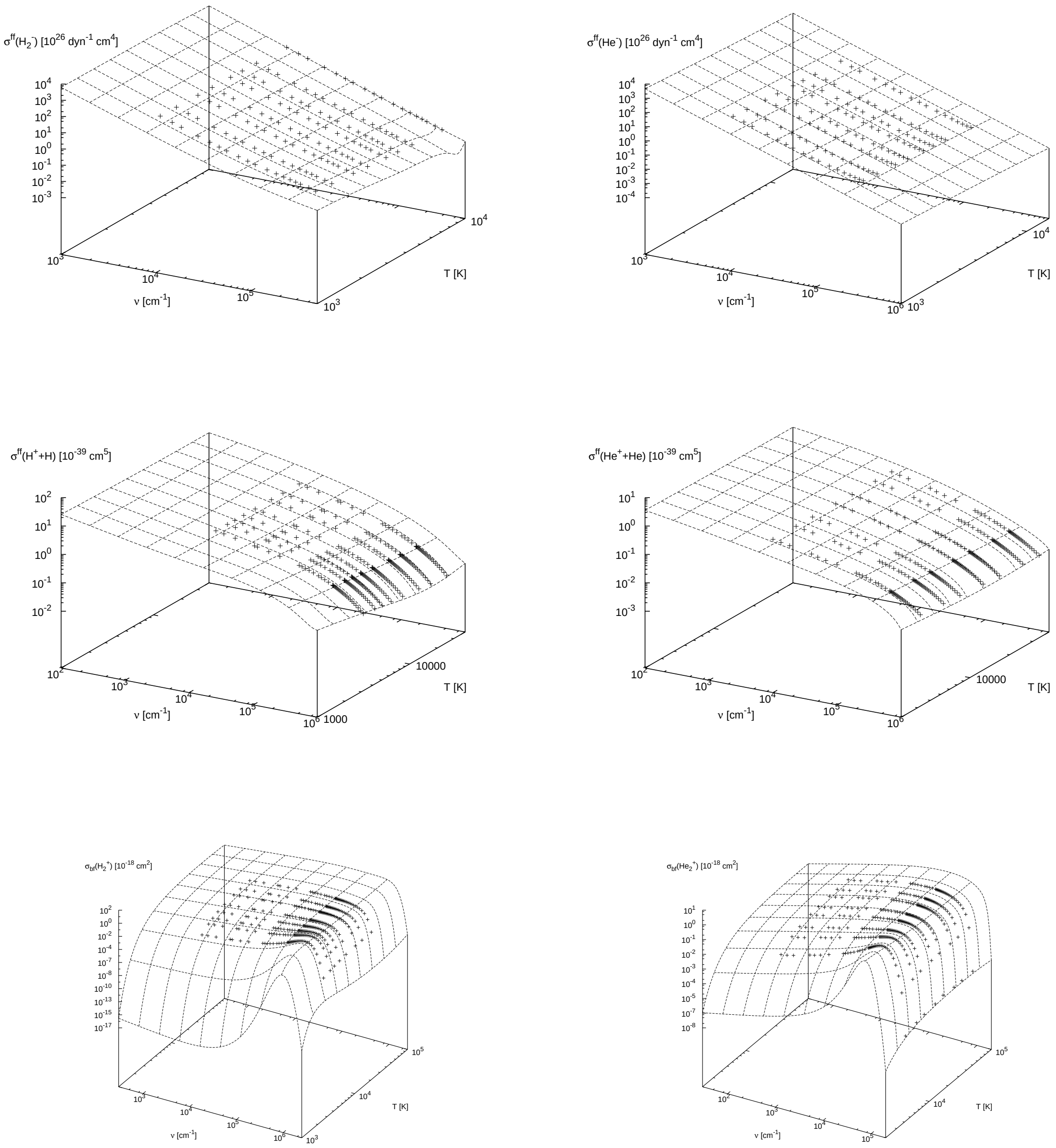


Abbildung C.1: Übersicht über die gefitteten Absorptionskoeffizienten

Zusammenfassung

$\sigma^{bf}(H^-)$	$6.09 < \frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 80$	$1400\ \mathrm{K} < T < 10080\ \mathrm{K}$
$\sigma^{ff}(H^-)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 55$	$1400\ \mathrm{K} < T < 10080\ \mathrm{K}$
$\sigma^{ff}(H_2^-)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 1000$	$10^3\ \mathrm{K} < T < 10^4\ \mathrm{K}$
$\sigma^{ff}(He^-)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 1000$	$10^3\ \mathrm{K} < T < 10^4\ \mathrm{K}$
$\sigma^{ff}(H^+ + H)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 100$	$1 \cdot 10^3\ \mathrm{K} < T < 4 \cdot 10^4\ \mathrm{K}$
$\sigma^{ff}(He^+ + He)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 100$	$3 \cdot 10^3\ \mathrm{K} < T < 4 \cdot 10^4\ \mathrm{K}$
$\sigma^{diss}(H_2^+)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 1000$	$10^3\ \mathrm{K} < T < 10^5\ \mathrm{K}$
$\sigma^{diss}(He_2^+)$	$\frac{\nu}{10^3\ \mathrm{cm}^{-1}} < 1000$	$10^3\ \mathrm{K} < T < 10^5\ \mathrm{K}$

Literaturverzeichnis

[Arg74] Argyros. Photodissociation of H_2^+: variation with temperature. *JPhysB*, 7, 74.

[Bas75] Bashkin, Stoner. *Atomic energy levels and grotrian diagrams : Hydrogen I - Phosphorus XV*. North Holland Publishing Company, 1 edition, 1975.

[Bel80] Bell. The free-free absorption coefficent of the negative ion of hydrogen. *JPhysB*, 13, 1980.

[Bel87] Bell, Berrington. The free-free absorption coefficient of the negative hydrogen ion. *JPhysB*, 20, 1987.

[Bel92] Bell, Berrington, Chroskery. The free-free absorption coefficent of the negative helium ion. *JPhysB*, 15, 1992.

[Bor85] Borysow, J.,Trafton, Frommhold, Birnbaum. Modeling of pressure-induced far-infrared absorption spectra: Molecular hydrogen pairs. *ApJ*, 296, 1985.

[Bor88] Borysow, J.,Frommhold, Birnbaum. Collision-induced rototranslational absorption spectra of H_2-He pairs at temperatures from 40 to 3000 K. *ApJ*, 326, 1988.

[Bor89a] Borysow, A.,Frommhold. Collision-induced infrared spectra of H_2-He pairs at temperatures from 18 to 7000 K: II. Overtone and hot bands. *ApJ*, 341, 1989.

[Bor89b] Borysow, A.,Frommhold, Moraldi. Collision-induced infrared spectra of H_2-He pairs involving 0 - 1 vibrational transitions and temperatures from 18 to 7000 K. *ApJ*, 336, 1989.

[Bor91] Borysow, A. Modeling of collision-induced infrared absorption spectra of H_2-H_2 pairs in the fundamental band at temperatures from 20 to 300 K. *Icarus*, 92, 1991.

[Bor01] Borysow, A., Jorgensen, Fu. High-temperature (1000-7000K) collision-induced absorption of H_2 pairs computed from the first principles, with application to cool and dense stellar atmospheres. *JQSRT*, 68, 2001.

[Bro99] Brodbeck, Bouanich, Nguyen-van-Thanh, Fu, Borysow, A. Collision-induced absorption of H_2 pairs in the second overtone band at 298 and 77.5 K: Comparison between experimental and theoretical result. *JChemPhys*, 110, 1999.

[Cox00] Cox(ed.). *Allen's astrophysical quantities.* Springer Verlag, 4 edition, 2000.

[Dae88] Daeppen, Mihalas, Hummer, Mihalas, W. The equation of state for stellar envelopes: III. Thermodynamic quantities. *ApJ*, 332, 1988.

[Dal68] Dalgarno, Williams. (exact title unknown). *ProcPhysSocGB*, 85, 1968.

[Fu,00] Fu, Zheng, Borysow, A. Quantum mechanical computation of collision-induced absorption in the second overtone band of hydrogen. *JQSRT*, 67, 2000.

[Gal98] Galli, Palla. The chemistry of the early universe. *A&A*, 335, 1998.

[Gus01a] Gustafsson, Frommhold. Infrared absorption spectra of collisionally interacting He and H atoms. *ApJ*, 546, 2001.

[Gus01b] Gustafsson, Frommhold. The HD-He complex: Interaction-induced dipole surface and infrared absorption spectra. *JChemPhys*, 115, 2001.

[Hum88] Hummer, Mihalas. The equation of state for stellar envelopes: I. An occupation probability formalism for the truncation of internal partition functions. *ApJ*, 331, 1988.

[Hun67] Hunger, van Blerkom. A pure helium model stellar atmosphere. *Zeitschrift fuer Astrophysik*, 66, 1967.

[Irw81] Irwin. Polynomial partition functions of 344 atomic and molecular species. *ApJS*, 45, 1981.

[Joh88] John. Continuous absorption by the negative hydrogen ion reconsidered. *A&A*, 193, 1988.

[Kir78] Kirby, Dalgarno. NaH and LiH in diffuse interstellar clouds. *ApJ*, 224, 1978.

[Kir88] Kirby, van Dieshoeck. (exact title unknown). *Advances in atomic molec. phys.*, 25, 1988.

[Kur70] Kurucz. Atlas: a Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres. *SAOSR*, 308, 1970.

[Lan74] Lang. *Astrophysical Formulae.* Springer, 1 edition, 1974.

[Len91] Lenzuni, Chernoff, Salpeter . Rosseland and Planck mean opacities of a zero-metallicity gas. *ApJS*, 76, 1991.

[Mih67] Mihalas. Statistical-equilibrium model atmospheres for early type stars: I. Hydrogen continua. *ApJ*, 149, 1967.

[Mih88a] Mihalas, Daeppen, Hummer . The equation of state for stellar envelopes: II. Algorithm and selected results. *ApJ*, 331, 1988.

[Mih88b] Mihalas, Hummer, Mihalas, W., Daeppen. The equation of state for stellar envelopes: IV. Thermodynamic quantities and selected ionization fractions for six elemental mixes. *ApJ*, 350, 1988.

[Rou99] Roueff, Zeippen. Rotational excitation of HD moelcules by He atoms. *A&A*, 343, 1999.

[Ryb79] Rybicki, Lightman. *Radiative processes in astrophysics*. John Wiley and S ons Inc., 1 edition, 1979.

[Sau84] Sauval, Tatum. A set of partition functions and equilibrium constants for 300 diatomic molecules of astrophysical interest. *ApJS*, 56, 1984.

[Sid92] Sidhu, Miller, Tennyson. Partition functions and equilibrium constants for H_3^+ and H_2D^+. *A&A*, 255, 1992.

[Sta94a] Stancil. Continuous absorption ny He_2^+ and H_2^+ in cool white dwarfs. *ApJ*, 430, 1994.

[Sta94b] Stancil. Partition functions and dissociation equilibrium constants for H_2+ and He2+. *JQSRT*, 51, 1994.

[Sta96] Stancil. Partition functions and dissociation equilibrium constants for LiH and LiH^+. *JQSRT*, 55, 1996.

[Sut98] Sutherland. Accurate free-free Gaunt factors for astrophysical plasmas. *MNRAS*, 300, 1998.

[van74] van Kranendonk. Intermolecular spectroscopy. *Physica*, 73, 1974.

[Var65a] Vardya. Pressure Dissociation and molecular hydrogen. *MNRAS*, 129, 1965.

[Var65b] Vardya. Thermodynamics of a solar composition gaseous mixture. *MNRAS*, 129, 1965.

[Var66a] Vardya. Pressure dissociation and high density adiabats. *MNRAS*, 133, 1966.

[Var66b] Vardya. Pressure Dissociation and the hydrogen molecular ion. *MNRAS*, 134, 1966.

[Ver96] Verner, Ferland, Korista. Atomic Data for astrophysics: II. New analytic fits for photoionization cross sections of atoms and ions. *ApJ*, 465, 1996.

[Wis79] Wishart. The bound-free photo detachment cross-section of H^-. *MNRAS*, 187, 1979.

[Zhe95] Zheng, Borysow, A. Modeling of collision-induced infrared absorption spectra of H_2 pairs in the first overtone band at temperatures from 20 to 500 K. *Icarus*, 113, 1995.

Danksagung

Zum Schluß dieser Arbeit möchte ich den Leuten danken, die diese Arbeit erst möglich gemacht haben:

- zuallererst Herrn Prof. Dr. W.J. Duschl für das interessante Thema, die gute Betreuung und die Möglichkeit zur frühen Abgabe der Arbeit
- Herrn Prof. Dr. P. Ulmschneider für die Bereitschaft zur Zweitkorrektur
- den Herren Profs. Dr. H.-P. Gail und R. Wehrse für ihre große Geduld für meine Fragen zu Zustandssummen, Saha-Theorie, Absorptionskoeffizienten und amagat
- Herrn Dr. Christian W. Straka für viele interessante und anregende fachliche und private Diskussionen, die hoffentlich auch künftig stattfinden werden.
- der allmittäglichen Espresso-Runde mit W.J.D. und C.W.S. und den vielen interessanten Einblicken und Diskussionen zu aktueller Forschung, Politik, etc.
- meinem Zimmerkollegen, Herrn Dr. Sebastian Els für viele faszinierende und interessante Erzählungen vom Beobachterdasein
- meiner WG im INF133 für das Verständnis, daß ich abends hin und wieder etwas später vom Institut nach Hause kam
- meinen Eltern für ihre fortwährende Unterstützung auf meinem Weg in die Astronomie

Erklärung:

Ich versichere, diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt zu haben.

Heidelberg, den