Fakultät für Physik und Astronomie

Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Diplomarbeit

im Studiengang Physik

vorgelegt von

Alexandra Tachil

aus Grevesmühlen

(2004)

Chemische Prozesse in primordialen Akkretionsscheiben

Die Diplomarbeit wurde von Alexandra Tachil ausgeführt am

Institut für theoretische Astrophysik in Heidelberg

unter der Betreuung von

Herrn Prof. Wolfgang J. Duschl

Welch großartigen Anblick muß der Sternenhimmel für einen Beobachter bieten, der in einem Planetensystem beheimatet ist, dessen Sonne zu einem Kugelsternhaufen gehört!

Rudolf Kippenhahn, *Hundert Milliarden Sonnen*

Abstract

Chemische Prozesse in primordialen Akkretionsscheiben

In dieser Diplomarbeit wird ein stationäres Akkretionsscheibenmodell, das nicht-selbstgravitierende, Kepler selbstgravitierende und vollständig selbstgravitierende Bereiche der Scheibe beschreibt, entwickelt. Da der Schwerpunkt auf der Modellierung von POP-III-Akkretionsscheiben liegt, wird dem entsprechend eine primordiale Chemie untersucht. Hierfür wird die zeitliche Entwicklung der Chemie des frühen Universums analysiert. Weiterhin werden die chemischen Eigenschaften eines solchen primordialen Gases bestimmt.
Mit der Monopol-Näherung werden numerische Lösungen für selbstgravitierende Scheibengebiete erhalten, die nicht von der radialen Struktur der Scheibe abhängig sind. Mit diesem Scheibenmodell werden protoplanetare Akkretionsscheiben und Scheiben mit der Größe von milchstraßenartigen Galaxien simuliert. Für eine protoplanetare Akkretionsscheibe werden die chemische und die viskose Zeitskala bestimmt und miteinander verglichen. Damit wird überprüft, ob sich das chemische Gleichgewicht innerhalb des Scheibengases einstellen kann.

Chemical processes in primordial accretion discs

In the present diploma thesis a stationary accretion disc model is developed describing discs in the non-selfgravitating, Keplerian selfgravitating as well as in the fully selfgravitating domain. Since the focus is set on modelling population III accretion discs a primordial chemistry is investigated. For that purpose an analysis of the temporal evolution of the chemistry in the primordial universe is performed. Moreover the chemical properties of such gases are determined.
Employing a monopole approximation numerical solutions for selfgravitating regions of accretion discs are obtained which do not depend on the radial structure of the disc itself. Based on this model protoplanetary as well as 'Milky-Way'-like accretion discs are simulated. For a protoplanetary disc both the viscous and the chemical time scale are calculated. In order to check whether or not the chemical equilibrium is achievable a comparison of both time scales is performed.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Am häufigsten vorkommende Objekte in unserem Universum sind scheibenförmige Gebilde. Hierzu gehören beispielsweise die Spiralgalaxien, deren scheibenähnliche Form besonders gut auf Edge-on-Aufnahmen (die Galaxie wird hierbei von der Seite beobachtet) zur Geltung kommt. Ein prominentes Beispiel einer solchen Galaxie ist die in Abbildung 1.1 dargestellte Sombrero Galaxie, die im Sternbild der Jungfrau beobachtet werden kann. Unsere eigene Galaxie, die Milchstraße, ist ebenfalls eine Spiralgalaxie und

Abbildung 1.1: Dieses Bild der Sombrero-Galaxie M 104 (NGC 4594) wurde am Anglo-Australian Telescope aufgenommen.

für einen Beobachter, der von außerhalb seitlich auf die Milchstraße blickt, sieht diese Galaxie der oben abgebildeten ähnlich.
Akkretionsscheiben existieren in den verschiedensten astrophysikalischen Umgebungen und kommen praktisch auf allen Größenskalen vor. Die kleinsten Scheiben sind Ringsysteme um Planeten. Das Ringsystem von Saturn, das derzeit von der Cassinisonde im Rahmen der Cassini-Huygens-Mission zum Saturn & Titan untersucht wird (siehe Abbildung 1.2), kann für einzelne Ringsegmente in guter Näherung durch die Akkretionsscheibentheorie beschrieben werden.
Auch die Entstehung unseres eigenen Sonnensystems wird heute durch die Bildung einer protostellaren Akkretionsscheibe erklärt. Besitzt eine aufgrund ihrer Eigengravitation kollabierende Massenverteilung eine nichtverschwindende Eigenrotation, kommt es wegen der Zentrifugalkraft zur Ausbildung eines scheibenförmigen Gebildes, der so genannten protostellaren Akkretionsscheibe. In ihrem Zentralbereich entwickelt sich der

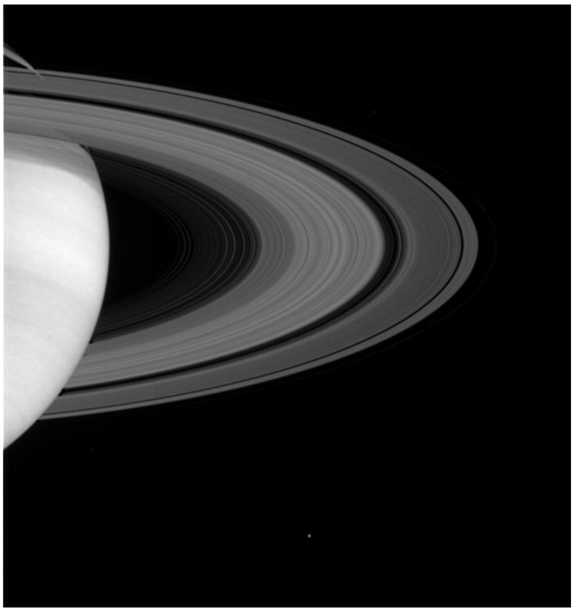


Abbildung 1.2: Der Planet Saturn und sein Ringsystem aufgenommen von der Cassinisonde im Mai 2004. Unterhalb der Ringe ist der vereiste Mond Enceladus zu erkennen.

Protostern (bezogen auf unser Sonnensystem ist dies die „Ursonne"). Seit wenigen Jahren ist es nun möglich, diese Art von Scheiben zu beobachten. In Abbildung 1.3 sind mehrere Beispiele solcher protoplanetaren Akkretionsscheiben dargestellt.
Die ersten Akkretionsscheiben wurden entdeckt, als Forscher kataklysmische Veränderliche - das sind Sterne, deren Helligkeit um viele Größenordnungen variieren kann - beobachteten. Genauere Untersuchungen ergaben, dass es sich hierbei um binäre Systeme, bei denen ein Primärstern von einem masseärmeren Sekundärstern umkreist wird, handelt. Durch Massentransport vom Sekundär- zum Primärstern kommt es zur Ausbildung einer Akkretionsscheibe. Eine umfassende Diskussion von Akkretion in Binärsystemen findet sich in [Frank02].
Die größten Akkretionsscheiben findet man in aktiven galaktischen Kernen (AGN für Active Galactic Nuclei). Dies sind Objekte, deren Regionen um den Galaxienkern sehr leuchtkräftig sind. Diese Aktivität wird auf das Vorhandensein einer Akkretionsscheibe um ein schwarzes Loch im Zentrum der Galaxie, deren Masse zwischen $10^6 - 10^9\,\mathrm{M}_\odot$ liegt, zurückgeführt.
Um die Entstehungsgeschichte unserer eigenen protoplanetaren Akkretionsscheibe in der Milchstraße und die Entwicklung astrophysikalischer Objekte in unserem Universum, die eine Akkretionsscheibe besitzen, besser zu verstehen, beschäftigen sich schon seit über 200 Jahren Forscher mit der theoretischen Beschreibung solcher scheibenförmigen Gebilde. Bereits 1755 beschrieb Kant in seiner *Allgemeinen Naturgeschichte und Theorie des Himmels* die physikalischen Grundlagen von Akkretionsscheiben. Mitte des zwanzigsten Jahrhunderts entstanden die ersten mathematischen Formulierungen der Akkretionsscheibentheorie von Weizsäcker (1943) und Lüst (1952). Doch erst seit 1972, als Shakura & Sunyaev die molekulare durch eine turbulente Viskosität ersetzten, wurde eine Be-

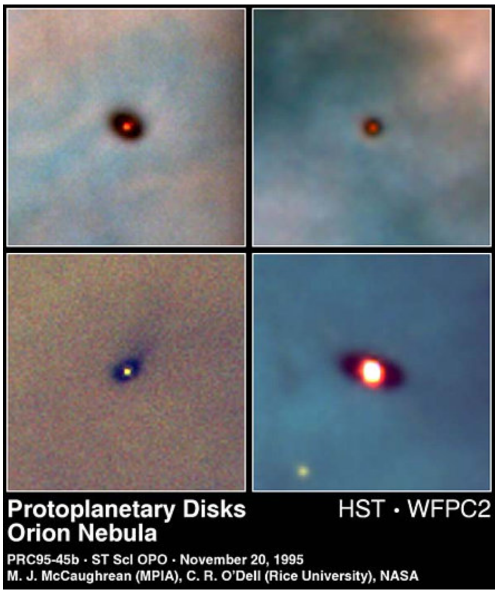


Abbildung 1.3: Hubble Space Telescope Bilder verschiedener protoplanetarer Scheiben, die um junge Sterne im Orionnebel gefunden wurden.

schreibung der Scheibenentwicklung möglich, deren Zeitskalen kleiner als die Hubblezeit sind. Unter Verwendung einer molekularen Viskositätsbeschreibung ist die Akkretionszeitskala mehrere Größenordnungen größer, als das Universum laut Urknalltheorie alt ist. Seitdem wurden durch eine Vielzahl von Forschungsarbeiten auf diesem Gebiet die Akkretionsscheibenmodelle stetig weiterentwickelt und verbessert.
Geht man davon aus, dass unser Universum vor ungefähr 13 Milliarden Jahren entstanden ist, muss es eine Entstehungsphase der ersten Sternengeneration - Population III (POP-III) - gegeben haben. Die chemische Zusammensetzung solcher Sterne zeichnet sich dadurch aus, dass sie aus den, durch den Urknall entstandenen, leichtesten Elementen Wasserstoff, Helium und Lithium besteht. Schwere Elemente entstanden erst durch Fusionsprozesse im Laufe der Sternenentwicklung. Nach unseren Vorstellungen, dass heutige Sterne in protostellaren Akkretionsscheiben entstehen, liegt die Annahme nahe, dass sich Sterne mit einer primordialen Chemie ebenfalls in Scheiben bilden. Aufgrund der verschiedenartigen chemischen Zusammensetzungen der heutigen und früheren Scheiben sind deutliche Unterschiede in deren Struktur und Entwicklung zu erwarten. Eine verbesserte Modellierung von POP-III-Akkretionsscheiben ist dank der in [Mayer04a] neu berechneten Opazitäten möglich und wurde bereits für protoplanetare Scheiben ohne Selbstgravitation in [Mayer04b] durchgeführt. Die grundlegenden Unterschiede der Modellierung in meiner Arbeit zu der aus dieser Veröffentlichung bestehen darin, dass erstens in meinem Scheibenmodell Selbstgravitation mitberücksichtigt wird und zweitens die Simulationen nicht nur auf protoplanetare Scheiben beschränkt sind. Auch die Entwicklung der ersten Galaxien wurde durch ihre primordiale Zusammensetzung geprägt.
Das in dieser Arbeit verwendete Scheibenmodell ist absichtlich einfach gehalten, um die Untersuchung von chemischen Prozesse innerhalb der Scheiben leichter implementieren

zu können. In den stationären, geometrisch dünnen Scheiben wird beispielsweise untersucht, ob die chemische Zeitskala kleiner als die viskose ist, denn die Berechnung der verwendeten POP-III-Opazitäten beruht auf dieser Annahme. Hierfür musste zuerst ein primordiales Reaktionsnetzwerk implementiert und dessen Verhalten und Eigenschaften untersucht werden. Folgende Zusammenfassung des Inhalts der einzelnen Kapitel soll einen Überblick über meine Arbeit geben:

Kapitel 2 - Chemische Reaktionsnetzwerke

In diesem Kapitel beschreibe ich die mathematische und numerische Behandlung von Teilchendichtenänderungen, denn das Ziel dieser Arbeit ist es, die zeitliche Entwicklung aller in einer Akkretionsscheibe vorkommenden Spezies zu untersuchen. Ich werde eine selbstgeschriebene Integrationsroutine, die die Teilchenzahldichtenänderungen berechnet, und alternativ dazu das Programmpaket Limex vorstellen. Um die Berechnungen der Dichtenänderungen zu testen, wird anschließend die chemische Entwicklung des frühen Universums bestimmt und die Ergebnisse mit denen von [Stancil98] verglichen. Im letzten Teil dieses Kapitels wird untersucht, wie die chemische Entwicklung von den physikalischen Größen Temperatur und Gasamtdichte abhängig ist.

Kapitel 3 - Analytische Modelle stationärer Akkretionsscheiben

Dieser Teil der Arbeit beschäftigt sich mit dem analytischen Lösen stationärer, geometrisch dünner und axialsymmetrischer Scheiben. Die grundlegenden Gleichungen für massearme und selbstgravitierende Akkretionsscheiben werden behandelt und es wird ein Gleichungssystem aufgestellt, das für eine protoplanetare Scheibe und eine Akkretionsscheibe, die die Morphologie unserer Milchstraße besitzt, gelöst wird. Da es ausschließlich analytische Ausdrücke für POP-I-Opazitäten für das optisch dicke Medium gibt, können auch nur staubhaltige optisch dicke Scheiben simuliert werden.

Kapitel 4 - Numerische Berechnungen zeitunabhängiger Scheibenmodelle

Das in Kapitel 3 aufgestellte Gleichungssystem wird auf zwei Gleichungen, die nur noch von der Temperatur und der Dichte abhängig sind, reduziert. Mit Hilfe von Opazitätstabellen kann der optisch dicke und optisch dünne Fall numerisch berechnet werden. Anschließend erfolgt der Vergleich der analytischen Lösung mit der numerischen. Am Ende dieses Kapitels werden protoplanetare und milchstraßenartige Scheiben, die aus primordialer Materie bestehen, simuliert und die Ergebnisse diskutiert.

Kapitel 5 - Chemische und viskose Zeitskalen im Vergleich

In diesem Kapitel wird die chemische Entwicklung eines Materievolumens, das vom Scheibenrand in Richtung Zentralmasse transportiert wird, untersucht. An repräsentativen Punkten innerhalb der Scheibe wird die chemische mit der viskosen Zeitskala verglichen.

2 Chemische Reaktionsnetzwerke

In diesem Kapitel untersuche ich die quantitative Entwicklung verschiedener Teilchenarten in einem gegebenen Volumen. Um dieses System vollständig beschreiben zu können, müssen die Gesamtdichte, die Temperatur und die möglichen chemischen Reaktionen bekannt sein. Hierbei bezeichnet man alle in einem System vorkommenden Spezies und die Reaktionen, die die Umwandlung dieser Teilchensorten ineinander beschreiben, als Reaktionsnetzwerk.
Ausgangspunkt ist die mathematische Beschreibung der zeitlichen Änderungen von Teilchenzahldichten der Spezies des Netzwerkes. Anschließend folgt die numerische Behandlung dieses chemisch-physikalischen Problems. Für Reaktionsnetzwerke mit wenigen Teilchensorten und Reaktionen habe ich in dieser Arbeit eine eigene Integrationsroutine, basierend auf einem Einschrittverfahren für autonome, also nicht explizit von der Zeit abhängige Systeme von Kaps und Rentrop, entwickelt. Für größere Netzwerke hat sich jedoch herausgestellt, dass dieser selbstgeschriebene Integrator nicht sehr effizient arbeitet. Deswegen verwende ich für die nachfolgenden sehr umfangreichen Netzwerke das Programmpaket LIMEX [Ehrig00].
Um das Verhalten chemischer Netzwerke zu testen und zu prüfen, betrachte ich nach der numerischen Behandlung folgende Fragestellung näher: Welche atomaren und molekularen Prozesse sind in der Entwicklung des frühen Universums wichtig?
Erste Arbeiten zu diesem Problem begannen Ende der siebziger Jahre Saslaw & Zipoy (1967) und Peebles & Dick (1968), die die Bildung von molekularem Wasserstoff, welcher in vielen astrophysikalischen Objekten für die molekulare Kühlung gebraucht wird, in der Gasphase untersuchten. Noch heute werden durch eine fortwährende Vervollständigung des Reaktionsnetzwerkes verbesserte Beschreibungen der zeitlichen Änderungen von chemischen Stoffen im frühen Universum erreicht.
Die Entwicklung dieser primordialen Chemie in Abhängigkeit von den physikalischen Größen Temperatur und Gesamtdichte des Systems wird am Ende dieses Kapitels noch genauer untersucht.

2.1 Die zeitliche Entwicklung von Teilchenzahldichten

Die Teilchdichteänderung der an den Reaktionen des Netzwerkes beteiligten Teilchensorte i erhält man durch Lösen der folgenden nichtlinearen gewöhnlichen Differenzialgleichung [Arnett96]

$$\dot{n}_i = \sum_j c_i(j)\lambda_j \, n_j + \sum_{j,k} c_i(j,k)\lambda_{jk} \, n_j \, n_k + \sum_{j,k,l} c_i(j,k,l)\lambda_{jkl} \, n_j \, n_k \, n_l \, . \tag{2.1}$$

Summiert wird über alle Reaktionen, bei denen diese Spezies entweder als Ausgangsstoff oder Reaktionsprodukt vorliegt. Der erste Term diser Gleichung beschreibt die Ab- bzw. Zunahme der Dichte durch Teilchenzerfälle oder, wie in dieser Arbeit vorkommend, Ionisation. Analog kommt der zweite Term durch Zweikörperstöße und der dritte Term durch Dreikörperstöße zustande. Nach Gleichung (2.1) ist die zeitliche Teilchendichtenänderung proportional zum Produkt der Dichten der Ausgangsstoffe, der zur Reaktion gehörenden temperaturabhängigen Reaktionsrate $\lambda_j(T)$ (bzw. $\lambda_{jk}(T)$ oder $\lambda_{jkl}(T)$) und dem dazugehörigen Koeffizenten c_i mit

$$\begin{aligned} c_i(j) &= \pm N_i \\ c_i(j,k) &= \pm \frac{N_i}{N_j!N_k!} \\ c_i(j,k,l) &= \pm \frac{N_i}{N_j!N_k!N_l!} \, . \end{aligned} \tag{2.2}$$

N_i (bzw. N_k, N_j und N_l) ist die absolute Anzahl der an der Reaktion teilnehmenden Teilchen der Sorte i. $N_i!$ verhindert die Doppelzählung von Reaktionen mit identischen Teilchen. Zum Schluss muss das richtige Vorzeichen gewählt werden, d.h., ein Minus, wenn die betrachtete Dichte abnimmt und ein Plus bei Dichtezunahme. Somit erhält man unter Berücksichtigung aller Teilchensorten des Reaktionsnetzwerkes das Differenzialgleichungssystem $\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{f}(\mathbf{n})$.
Das folgende Beispiel dient der Veranschaulichung.

$$\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H} \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} \mathrm{H}_2 + \mathrm{H}$$

In dieser Hin- und Rückreaktion ist k_1 die Reaktionsrate der Hinreaktion und k_2 die entsprechende Reaktionsrate der Rückreaktion. Man erhält die nachfolgenden zwei Gleichungen für die zeitliche Änderung der Teilchenzahldichte des atomaren und des molekularen Wasserstoffs

$$\begin{aligned} \dot{n}_H &= -\frac{1}{2} \, k_1 \, n_H^3 + \frac{1}{6} \, k_1 \, n_H^3 - k_2 \, n_{H_2} n_H + 3 \, k_2 \, n_{H_2} n_H \\ \dot{n}_{H_2} &= \frac{1}{6} \, k_1 \, n_H^3 - k_2 \, n_{H_2} n_H \, . \end{aligned}$$

2.2 Numerische Verfahren

Zum Lösen solcher Differenzialgleichungssysteme muss man sich mit dem für chemische Reaktionskinetik typischen Problem befassen, dass die Zeitskalen der Reaktionen sehr unterschiedlich sein können. In diesem Fall unterscheiden sich die Koeffizienten des Gleichungssystems, das man dann auch als steif bezeichnet, um Größenordnungen. Im Allgemeinen gilt dies für Gleichungssysteme $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathrm{x}, \mathbf{y})$, deren Jacobimatrix $f_y(x, \mathbf{y})$ Eigenwerte λ mit folgenden Eigenschaften besitzt:

- Einige der Eigenwerte haben Realteile, die sehr viel kleiner als null sind.
- Das Verhältnis vom größten zum kleinsten Eigenwert $|\frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}|$ wird sehr groß.

Dies führt bei der numerischen Interation solcher Differenzialgleichungssysteme zu größeren Schwerigkeiten. Bei steifen Systemen muss die zeitliche Entwicklung der Dichten über einen sehr großen Zeitraum berechnet werden. Deswegen ist es wichtig, dass der zur numerischen Simulation verwendete Integrator die Schrittweite so wählt, dass die Rechenzeit bei klein bleibenden Diskretisierungsfehlern minimiert wird.

2.2.1 Einschrittverfahren nach Kaps und Rentrop

Die Berechnungen der Teilchenzahldichtenänderungen werden mit dem Einschrittverfahren für autonome Systeme $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ [Stoer00], welches von Kaps und Rentrop 1979 entwickelt wurde, durchgeführt, da dieses Verfahren sehr effizient sein soll. Zur Bestimmung der optimalen Schrittweite dt werden zwei Näherungslösungen ($\bar{\mathbf{n}}_{i+1}$,$\hat{\mathbf{n}}_{i+1}$) des Anfangswertproblems $\dot{\mathbf{n}} = \mathbf{f}(\mathbf{n})$, welche durch zwei unterschiedliche Einschrittverfahren $\mathbf{\Phi}_{\mathrm{I}}$, $\mathbf{\Phi}_{\mathrm{II}}$ vom Runge-Kutta-Typ der Ordnung 3 und 4 berechnet werden, miteinander verglichen.

$$\bar{\mathbf{n}}_{i+1} = \hat{\mathbf{n}}_i + dt\mathbf{\Phi}_{\mathrm{I}}(\hat{\mathbf{n}}_i; dt) \tag{2.3}$$

$$\hat{\mathbf{n}}_{i+1} = \hat{\mathbf{n}}_i + dt\mathbf{\Phi}_{\mathrm{II}}(\hat{\mathbf{n}}_i; dt) \tag{2.4}$$

$$\text{mit } \mathbf{\Phi}_{\mathrm{I}}(\mathbf{n}; dt) = \sum_{k=1}^{3} c_k \mathbf{f}_k^*(\mathbf{n}; dt) \tag{2.5}$$

$$\mathbf{\Phi}_{\mathrm{II}}(\mathbf{n}; dt) = \sum_{\mathrm{k}=1}^{4} \hat{\mathrm{c}}_k \mathbf{f}_k^*(\mathbf{n}; dt) \tag{2.6}$$

wobei hier für die $\mathbf{f}_k^* := \mathbf{f}_k^*(\mathbf{n}; dt)$ gilt

$$\mathbf{f}_k^* := \mathbf{f}(\mathbf{n} + dt \sum_{l=1}^{k-1} \beta_{kl} \mathbf{f}_l^*) + dtf'(\mathbf{n}) \sum_{l=1}^{k} \gamma_{kl} \mathbf{f}_l^* \tag{2.7}$$

$f'(\mathbf{n})$ ist in dieser Gleichung die Jacobi-Matrix. Die Bestimmung der Funktionen $\mathbf{f}_k^*(\mathbf{n}; dt)$ muss für jede neue Berechnung der Schrittweite wiederholt werden. Die vorkommenden Koeffizienten sind nach [Stoer00] wie folgt zu wählen:

$$
\begin{aligned}
&\gamma_{kk} = 0.220428410 && && \\
&\gamma_{21} = 0.822867461 && && \\
&\gamma_{31} = 0.695700194 && \gamma_{32} = 0 && \\
&\gamma_{41} = 3.90481342 && \gamma_{42} = 0 && \gamma_{43} = 1 \\
&\beta_{21} = -0.554591416 && && \\
&\beta_{31} = 0.252787696 && \beta_{32} = 1 && \\
&\beta_{41} = \beta_{31} && \beta_{42} = \beta_{32} && \beta_{43} = 0 \\
&\hat{c}_1 = 0.545211088 && c_1 = -0.162871035 && \\
&\hat{c}_2 = 0.301486480 && c_2 = 1.18215360 && \\
&\hat{c}_3 = 0.177064668 && c_3 = -0.0192825995 && \\
&\hat{c}_4 = -0.0237622363\ . && &&
\end{aligned}
$$

Die neue Schrittweite kann nun wie folgt aus der Schrittweite des vorherigen Iterationsschrittes berechnet werden

$$dt_{\mathrm{neu}} = 0.9 dt_{\mathrm{alt}} \sqrt[4]{\frac{\varepsilon}{|\hat{\mathbf{n}}_{i+1} - \bar{\mathbf{n}}_{i+1}|}}\,. \tag{2.8}$$

Der Parameter ε sollte so gewählt werden, dass eine möglichst große Schrittweite bei einem zu vernachlässigenden Diskretisierungsfehler erreicht wird.

2.2.2 Die Programme

In diesem Unterkapitel möchte ich den Aufbau und die Funktionsweise eines meiner in der Sprache C geschriebenen Programme, mit denen die zeitliche Änderung der Teilchenzahldichten berechnet wird, beschreiben. Anschließend werden verschiedene mit diesem Programm berechnete zeitliche Entwicklungen eines Netzwerkes dargestellt, wobei hier das Verhalten des Netzwerkes unter Variation der Anfangsdichten und der thermodynamischen Größe Temperatur untersucht wird.

Schematische Darstellung des Hauptprogramms

Eingabegrößen
Vor dem Programmablauf müssen die das Reaktionsnetzwerk bildenden Reaktionen aus den nachfolgenden, willkür gewählten, Reaktionen bestimmt werden.

$$
\begin{gathered}
\mathrm{H}^+ + \mathrm{e}^- \rightleftharpoons \mathrm{H} + \nu \\
\mathrm{H} + \mathrm{e}^- \rightleftharpoons \mathrm{H}^- + \nu \\
\mathrm{H}^+ + \mathrm{H}^- \rightarrow \mathrm{H} + \mathrm{H} \\
\mathrm{H} + \mathrm{H}^+ \rightleftharpoons \mathrm{H}_2^+ + \nu \\
\mathrm{H} + \mathrm{H}^- \rightarrow \mathrm{H}_2 + \mathrm{e}^- \\
\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H} \rightleftharpoons \mathrm{H}_2 + \mathrm{H} \\
\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H}_2 \rightleftharpoons \mathrm{H}_2 + \mathrm{H}_2 \\
\mathrm{H}_2^+ + \mathrm{H} \rightleftharpoons \mathrm{H}_2 + \mathrm{H}^+
\end{gathered}
$$

Da noch keine Temperaturveränderungen berücksichtigt werden, gehört die Temperatur neben dem ε der Schrittweitensteuerung und den Anfangsdichten zu den vor Ablauf des Programms festzulegenden Parametern.

Programmablauf
Alle Informationen jeder einzelnen Reaktion (wie z.B. Anzahl und Art der Ausgangsstoffe) sind in einer Struktur am Anfang des Programms zusammengefasst. In dieser muss auch festgelegt werden, ob die entsprechend zur Struktur gehörende Reaktion dem Netzwerk hinzugefügt wird.
Zuerst bestimmt das Programm, welche der sechs möglichen Stoffe aus den obigen Reaktionsgleichungen in dem zu untersuchenden Netzwerk vorkommen.
Danach wird die erste Schrittweite ermittelt. Dies ist im Programm wie folgt realisiert: mit einem vorgegebenen Zeitschritt dt wird mit dem impliziten Euler-Verfahren, welches auch für steife Probleme geeignet ist, die relative Teichenzahldichtenänderung berechnet. Ist diese zu groß, so dass der Diskretisierungsfehler ebenfalls zu groß wird, wird dt verkleinert und umgekehrt. Bei zu kleiner relativer Dichtenänderung kann der Zeitschritt vergrößert werden. Bei einer relativen Änderung der Dichten im Bereich zwischen ein bis zwei Prozent hat man die erste Dichtenänderung berechnet.
Die berechnete Schrittweite wird nun im Programm in die folgende `while`-Schleife übernommen. In diese Schleife muss der Benutzer auch die Zeit eingeben, die dem Netzwerk für die zeitliche Entwicklung zur Verfügung steht. Mit dem Einschrittverfahren von Kaps und Rentrop wird nun aus der alten Schrittweite die neue berechnet und mit dieser werden dann mittels Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung die neuen Dichten ermittelt.

Ausgabe
Am Schleifenende werden die Teilchenzahldichten mit der zugehörigen Zeit, der Gesamtdichte und der letzten Schrittweite in eine Textdatei geschrieben. Das Herausschreiben der Gesamtteilchenzahldichte dient der Überprüfung der Teilchenzahlerhaltung.

Entwicklung eines chemischen Netzwerkes

Zur Untersuchung des zeitlichen Verhaltens wurden aus den vorherigen Reaktionen die ersten acht ausgewählt, da die Ergebnisse mit diesen Reaktionen sehr übersichtlich sind. Zunächst wird bei konstanter Temperatur von 2000 K die chemische Entwicklung des Netzwerks mit zwei unterschiedlichen Anfangsdichten (siehe Tabelle 2.1) berechnet. Die

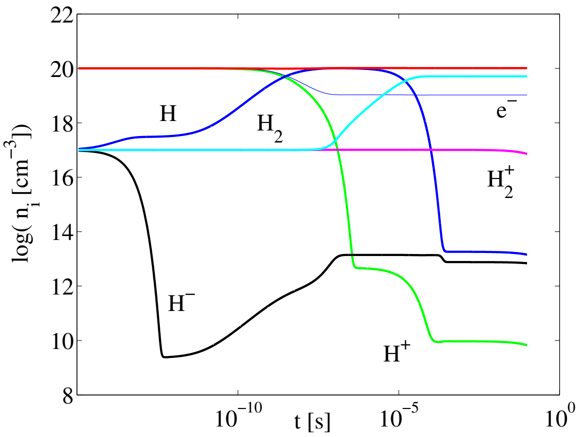
Spezies	Ausgangsdichte	Dichtevariation
H^+	$10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{10}\mathrm{cm}^{-3}$
e^-	$10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{10}\mathrm{cm}^{-3}$
H	$10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{7}\mathrm{cm}^{-3}$
H^-	$10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{7}\mathrm{cm}^{-3}$
H_2	$10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{7}\mathrm{cm}^{-3}$
H_2^+	$10^{17}\mathrm{cm}^{-3}$	$10^{7}\mathrm{cm}^{-3}$

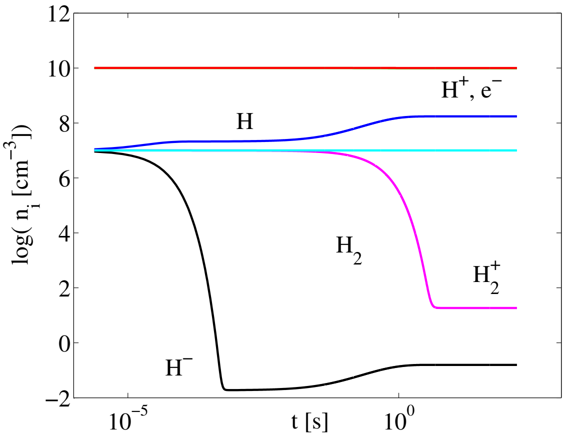
Tabelle 2.1: Variation der Anfangsteilchenzahldichten der im Netzwerk vorkommenden Spezies H^+, e^-, H, H^-, H_2 und H_2^+

dazugehörigen Dichteverläufe sind in Abbildung 2.1 oben dargestellt. Da die Temperatur konstant ist, sind die unterschiedlichen Anfangsdichten, die um zehn Größenordnungen variiert wurden, für die unterschiedlichen Entwicklungen der beiden Systeme verantwortlich. Besonders auffällig sind zum einen die sehr unterschiedlichen Zeiten, die das Netzwerk braucht, um ins Gleichgewicht zu laufen und zum anderen die völlig unterschiedlichen Kurvenverläufe der Teilchenzahldichten. Je größer die Dichten sind, desto wahrscheinlicher sind Stöße der Teilchen untereinander und das System findet schneller ins Gleichgewicht. Die Reaktionszeitskalen, auf die später noch genauer eingegangen wird, sind umgekehrt proportional zu den Anfangsdichten. Dadurch, dass sich diese Zeitskala für jede einzelne Reaktion ändert, verschiebt sich auch der Zeitpunkt, zu dem diese Reaktion wichtig wird und man erhält vollkommen andere Dichteentwicklungen.
Als Nächstes wurde die Temperatur bei konstant gehaltenen Ausgangsdichten aus der Tabelle 2.1 auf 22000 K erhöht. Die Reaktionszeitskalen, die auch umgekehrt proportional zur Reaktionsraten sind, verschieben sich wieder und wir erhalten, wie in Abbildung 2.1 zu sehen ist, im Vergleich zu der Systementwicklung bei 2000 K andere Verläufe.
Wie bereits erwähnt, beschränken die langen Rechenzeiten dieser numerischen Integrationsmethode die Größe des zu untersuchenden chemischen Netzwerkes erheblich, so dass kommende Berechnungen eines größeren Netzwerkes mit über zwanzig Spezies und einhundertfünfzig Reaktionen mit diesem Verfahren unmöglich erscheinen. Zeitsparendes numerisches Lösen von differenzial-algebraischen Gleichungen der Form

$$B(t,\mathbf{n})\,\mathbf{n}'(t) = \mathbf{f}(t,\mathbf{n}) \tag{2.9}$$

bietet das Programmpaket LIMEX (Linear IMplizit Euler method with eXtrapolation), welches besonders für steife Gleichungssysteme geeignet ist und deshalb für alle folgenden Berechnungen chemischer Netzwerkentwicklungen genutzt wird.





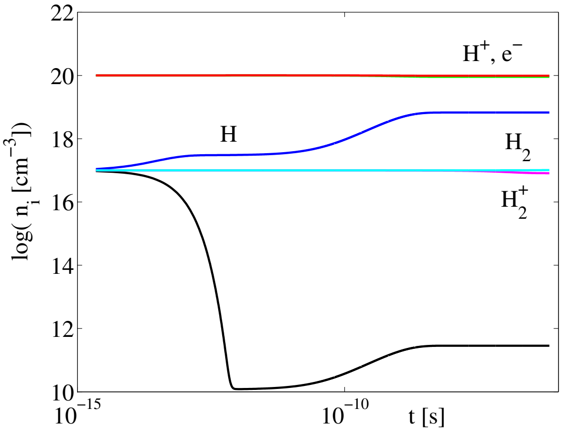


Abbildung 2.1: oben: Vergleich der zeitlichen Entwicklungen der Teilchenzahldichten n(x) der Spezies x bei einer konstant gehaltenen Temperatur von 2000 K und unterschiedlichen Anfangsteilchenzahldichten. **unten**: Vergleich mit dem linken Bild oben: die Systeme haben identische Anfangsteilchenzahldichten, aber unterschiedliche Temperaturen (unten 22000 K). Die rote Linie dient zur Überprüfung der Massenerhaltung ($m_{\text{gesamt}}/m_{\text{Proton}}$ cm^{-3}).

2.3 Chemische Entwicklung des expandierenden Universums

Die Bildung von Molekülen in primodialen Gasen soll im Rahmen der Einstein-de Sitter-Kosmologie näher untersucht werden, um so Aufschluss über das Verhalten der im Gas enthaltenen Stoffe zu erhalten. Laut Urknalltheorie entstanden kurz nach dem Urknall die drei Elemente Wasserstoff, Helium und Lithium sowie einige ihrer Isotope. Die Bildung der schweren Elemente vollzog sich erst viel später bei der Sternentwicklung.
Durch Untersuchungen dieser so genannten POP-III-Chemie werden wir im Folgenden die für die stoffliche Entwicklung des Universums wichtigsten Reaktionen und Bildungswege einiger Stoffe ausmachen.

2.3.1 Primordiale Chemie

Zur Untersuchung der chemischen Entwicklung des aus insgesamt 23 verschiedenen Teilchensorten (e^-, H, H^+, H^-, H_2, H_2^+, H_3^+, D, D^+, D^-, HD, HD^-, He , He^+, HeH^+, HeD^+, He_2^+, Li, Li^+, Li^-, LiH und LiH^+) bestehenden Gasgemisches im expandierenden Weltall werden die im Anhang A stehenden Reaktionen verwendet. In Abbildung 2.2 sind alle Reaktionen des Wasserstoffnetzwerkes bis auf diese vier Reaktionen

$$\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H} \rightleftharpoons \mathrm{H_2} + \mathrm{H}$$
$$\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H_2} \rightleftharpoons \mathrm{H_2} + \mathrm{H_2}$$

dargestellt. Erst wenn die Gasdichten größer als 10^9 cm^{-3} sind, werden diese Dreikörperstöße wichtig. Die relativen Häufigkeiten der Elemente, ausgedrückt durch die Parameter

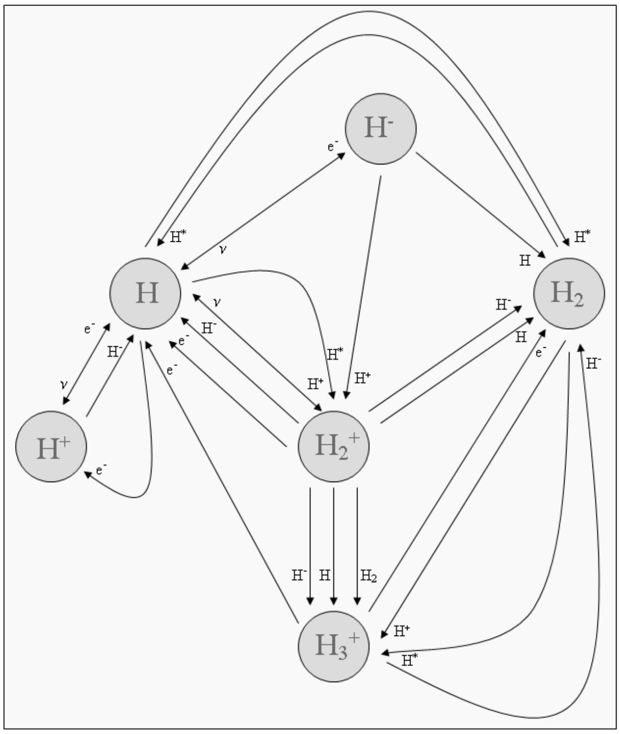


Abbildung 2.2: Reaktionen der Wasserstoffspezies im frühen Universum

X, Y und Z, wurden der Arbeit [Stancil98] entnommen. Hierbei ist X das Verhältnis der Masse aller Wasserstoffspezies zur Gesamtmasse des Gases, Y ist der Massenanteil der Heliumspezies und Z der Massenanteil aller Elemente, die schwerer als Helium sind.

Massenanteil	
X	0.758
Y	0.242
Z	0

Anzahlhäufigkeiten	
$n_{\mathrm{He}}/n_{\mathrm{H}}$	$8.02 \cdot 10^{-2}$
$n_{\mathrm{D}}/n_{\mathrm{H}}$	$4.0 \cdot 10^{-5}$
$n_{\mathrm{Li}}/n_{\mathrm{H}}$	$2.3 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 2.2: Massenbruchteile (links) und Anzahlhäufigkeiten (rechts) nach [Stancil98]

2.3.2 Chemische Prozesse im frühen Universum

In diesem Abschnitt rechne ich die zeitliche Entwicklung des primordialen Gases, wie sie in [Stancil98] zu finden ist, ab einer Rotverschiebung von $z = 2000$, bei der alle Atome ionisiert sind, bis $z = 10$ nach. Die chemische Zusammensetzung entspricht der im vorherigen Abschnitt besprochenen. Anschließend wird sich zeigen, ob die Art und Weise, wie ich die Änderungen der Teilchenzahldichten berechne, richtig ist. Außerdem können so einzelne Reaktionskanäle, die den Aufbau einzelner Spezies beschreiben, eingehend untersucht werden, um das Verhalten dieses Netzwerkes besser zu verstehen. Dies ist wichtig, da es bei der Modellierung der POP-III-Scheiben im weiteren Verlauf dieser Arbeit um den Einfluss dieser primordialen Chemie geht.
Da die Ausdehnung des Universums proportional zu $(1 + z)^{-1}$ ist und die Dichte mit der räumlichen Ausdehnung abnimmt, bekommt man für die Teilchenzahldichte folgende z-Abhängigkeit $n \propto (1+z)^3$. Die Wasserstoffdichte n_H (dies ist die Summe aller Dichten der Stoffe, die Wasserstoff enthalten) bei der Rotverschiebung z ist

$$n_H(z) = 1.123 \cdot 10^{-5}(1 - Y)\Omega_b h^2(1 + z)^3\mathrm{cm}^{-3} \ , \tag{2.10}$$

wobei in dem von mir gewählten Standardmodell Y der Heliumanteil, Ω_b das Verhältniss von baryonischer Dichte zur kritischen Dichte und h die Hubblekonstante in den Einheiten 100 km s^{-1} Mpc^{-1} ist.
Da die Teilchenzahldichteänderungen pro Zeit ausgerechnet werden und die Wasserstoffdichte, wie sie oben berechnen wird, von der Rotverschiebung abhängt, brauchen wir die Formel

$$\frac{dt}{dz} = \frac{1}{H_0(1 + z)^2\sqrt{1 + \Omega_0 z}} \ , \tag{2.11}$$

um die Rotverschiebung in Zeit und umgekehrt umzurechen. Der Dichteparameter Ω_0 und alle weitere Parameter sind in Tabelle 2.3 aufgeführt.

Parameter	
Ω_0	1.0
Ω_b	0.0367
h	0.67
Y	0.242
η (Baryon-zu Photon-Verhältnis)	$4.5 \cdot 10^{-10}$

Tabelle 2.3: Parameter des kosmologischen Modells

Die Strahlungstemperatur wird durch

$$T_{rad} = T_0(1 + z) \tag{2.12}$$

gegeben, wobei mit $T_0 = 2.728$ K die heutige Temperatur der Hintergrundstrahlung mit eingeht. Die zeitliche Änderung der Gastemperatur wird durch die Gleichung

$$\frac{dT_{gas}}{dt} = -2T_{gas}\frac{\dot{R}}{R} + \frac{2}{3kn}[(\Gamma - \Lambda)_{\mathrm{Compton}} + (\Gamma - \Lambda)_{\mathrm{mol}}] \tag{2.13}$$

bestimmt. Der erste Term gibt die Kühlung durch die adiabatische Expansion an. $R(t)$ ist der Skalenfaktor. Die beiden anderen Terme repräsentieren den Energieübertrag der Hintergrundstrahlung auf das Gas durch Compton-Streuung der Photonen der Hintergrundstrahlung an Gaselektronen und die Energieauf- bzw Abnahme des Gases durch An- und Abregung der Moleküle H_2, HD und LiH. Da die Betrachtungen der Übergänge in den Molekülen zeitlich sehr aufwändig sind, verwende ich für die thermische Entwicklung des Gases einen Fit an die Daten der Gastemperaturentwicklung aus [Puy93] (siehe Abbildung 2.3).

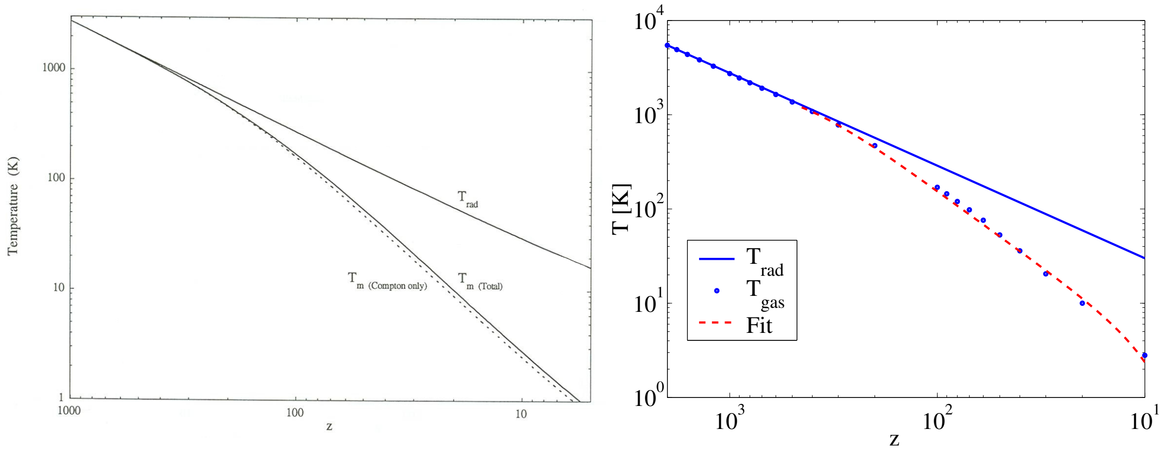


Abbildung 2.3: links: Entwicklung der Strahlungstemperatur T_{rad}, der Gastemperatur ohne molekularen Beitrag $\text{T}_{\text{m(Compton only)}}$ und der Gastemperatur $T_{\text{m(Total)}}$ [Puy93]. **rechts**: Verlauf der Strahlungs- und Gastemperatur nach [Puy93], (rot gestrichelte Linie) Gastemperaturfit mittels Polynom 4. Ordnung.

Für Rotverschiebungen größer als $z = 450$ gilt $T_{\text{gas}} = T_{\text{rad}}$ und für kleinere Rotverschiebungen wird dieser Gastemperaturfit verwendet

$$T_{gas} = 1.3281 \cdot 10^{-8}\, z^4 - 2.4153 \cdot 10^{-5}\, z^3 + 0.012987\, z^2 + 0.61843\, z - 3.9893\ . \qquad (2.14)$$

Die relativen Häufigkeiten der Stoffe $n(x)/n_H$ bei $z = 2000$ wurden aus den Darstellungen der chemischen Enwicklungen in Abbildung 2.4 abgeschätzt. Die selbst berechneten Teilchendichteänderungen sind in Abbildung 2.5 für jedes Element und für das Deuterium Netzwerk einzeln dargestellt. Die Verläufe der Dichten in Abbildung 2.4 und 2.5 stimmen bis auf geringe Abweichungen sehr gut überein. Für $z = 10$ sind die relativen Häufigkeiten zum Vergleich in der Tabelle 2.4 aufgeführt. Berücksichtig man, dass die Gastemperatur in [Puy93] für zu hohe Moleküldichten (bei LiH ganze neun Größenordnungen) berechnet wurden und dadurch die Gastemperatur etwas zu klein ist, da der Kühleffekt der Moleküle überwiegt, sind die berechneten relativen Häufigkeiten sehr zufriedenstellend.

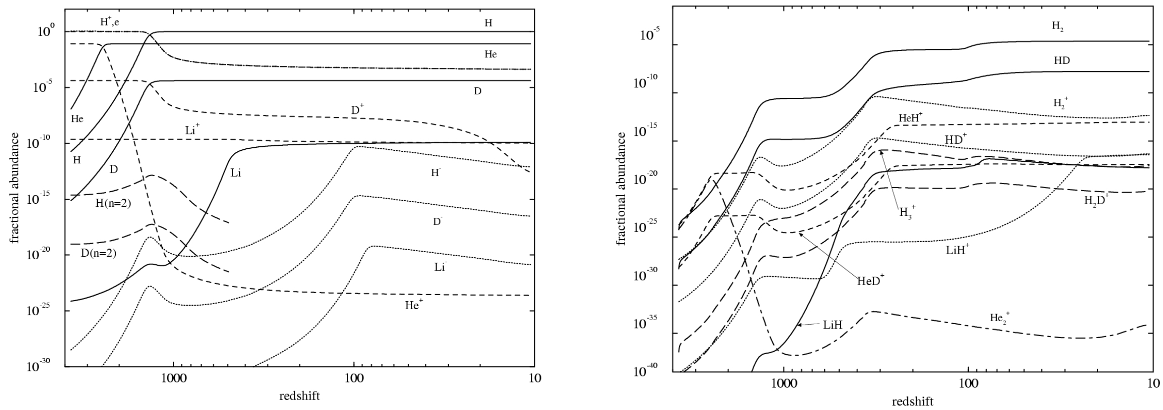


Abbildung 2.4: Relative Häufigkeiten $n(x)/n_H$ aller chemischen Spezies aus [Stancil98].

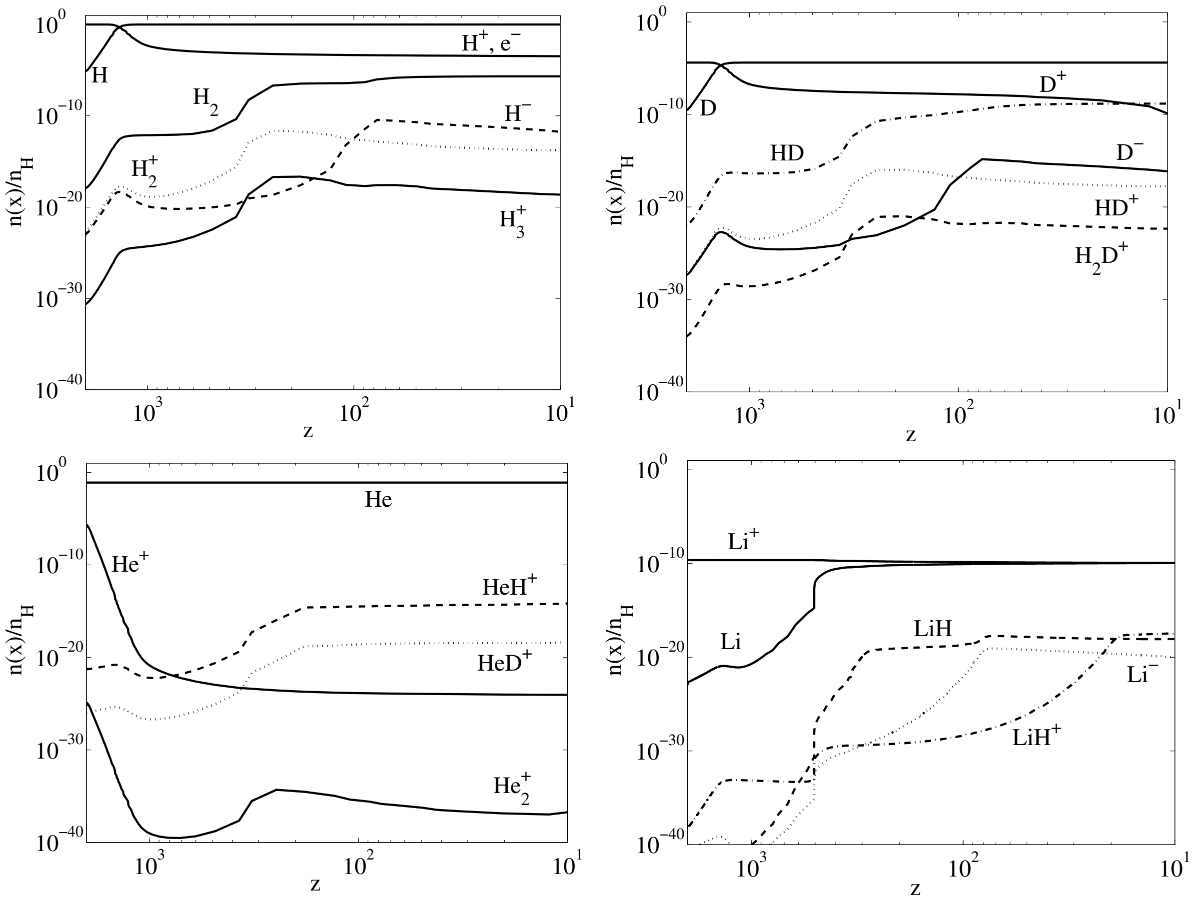


Abbildung 2.5: Die zeitliche Entwicklung aller Spezies als Funktion der Rotverschiebung (**oben links**: H, **oben rechts**: D, **unten links**: He und **unten rechts**: Li).

	$n(\mathrm{x})/n_\mathrm{H}$ (z = 10)			$n(\mathrm{x})/n_\mathrm{H}$ (z = 10)	
x	diese Arbeit	Stancil	x	diese Arbeit	Stancil
H	0.9995	0.9996	H_2D^+	$1.1 \cdot 10^{-22}$	$4.8 \cdot 10^{-22}$
H^+, e^-	$4.6 \cdot 10^{-4}$	$4.0 \cdot 10^{-4}$	He	0.0799	0.0804
H^-	$7.9 \cdot 10^{-13}$	$7.4 \cdot 10^{-13}$	He^+	$4.3 \cdot 10^{-24}$	$1.8 \cdot 10^{-24}$
H_2^+	$5.6 \cdot 10^{-14}$	$4.2 \cdot 10^{-14}$	He_2^+	$2.0 \cdot 10^{-35}$	$6.1 \cdot 10^{-36}$
H_2	$2.3 \cdot 10^{-6}$	$2.4 \cdot 10^{-6}$	HeH^+	$1.2 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-14}$
H_3^+	$3.0 \cdot 10^{-19}$	$2.1 \cdot 10^{-19}$	HeD^+	$7.9 \cdot 10^{-19}$	$7.1 \cdot 10^{-19}$
D	$4.0 \cdot 10^{-5}$	$4.0 \cdot 10^{-5}$	Li	$1.1 \cdot 10^{-10}$	$1.2 \cdot 10^{-10}$
D^+	$1.4 \cdot 10^{-13}$	$2.4 \cdot 10^{-13}$	Li^+	$1.2 \cdot 10^{-10}$	$1.1 \cdot 10^{-10}$
D^-	$3.1 \cdot 10^{-17}$	$2.9 \cdot 10^{-17}$	Li^-	$9.5 \cdot 10^{-21}$	$1.4 \cdot 10^{-21}$
HD	$1.6 \cdot 10^{-9}$	$1.6 \cdot 10^{-9}$	LiH^+	$3.7 \cdot 10^{-18}$	$3.6 \cdot 10^{-18}$
HD^+	$4.9 \cdot 10^{-18}$	$3.8 \cdot 10^{-18}$	LiH	$8.6 \cdot 10^{-19}$	$1.6 \cdot 10^{-19}$

Tabelle 2.4: Vergleich der in dieser Arbeit berechneten relativen Häufigkeiten $n(x)/n_H$ bei $z = 10$ mit denen aus [Stancil98].

Nun, da die Berechnungen der Dichten gut funktionieren, werden noch einige Bildungsprozesse genauer untersucht. Als die Strahlungstemperatur des frühen Universums mit abnehmender Rotverschiebung kleiner wurde, bildeten sich zuerst die Ionen Li^{2+}, Li^+ und He^+ und dann die Atome He, H und Li in Reihenfolge abnehmender Ionisierungsenergien. Das erste Molekülion, das im frühen Universum entstand, war das HeH^+. Kaum gebildet, reagierte es sofort mit atomarem Wasserstoff und es bildete sich H_2^+, welches wiederum mit dem atomaren Wasserstoff zu H_2 weiterreagierte.

$$\mathrm{H^+ + He \rightarrow HeH^+} + \nu$$
$$\mathrm{HeH^+ + H \rightarrow H_2^+ + He}$$
$$\mathrm{H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+}$$

H_2 war das erste neutrale Molekül, das sich im Universum gebildet hatte und es blieb auch das am häufigsten vorkommende. In der obigen Reaktionsserie wirken He und H^+ als Katalysatoren. Dies ist die erste Bildungsstufe von molekularem Wasserstoff. Im Folgenden werden wir uns die weiteren Bildungswege (so genannte Kanäle) näher anschauen, da dieses Molekül in vielen astrophysikalischen Anwendungen neben HD und LiH stets wichtig für die molekulare Kühlung ist.
Später, als sich das Universum weiter abgekühlt hatte, wurde das H_2^+ hauptsächlich durch die folgende Reaktion gebildet:

$$\mathrm{H^+ + H \rightarrow H_2^+} + \nu\ .$$

Die H_2^+ Moleküle reagierten dann wie gehabt zum H_2. Dies ist der so genannte H_2^+-Kanal. Wie wichtig diese Reaktion für die Entwicklung der H_2-Dichte ist, sieht man im linken Diagramm der Abbildung 2.6. Diese eine Reaktion wurde aus dem Netzwerk entfernt. Man sieht, dass zwischen $900 > z > 100$ genau diese Reaktion für die H_2 Bildung verantwortlich ist. Für kleinere Rotverschiebungen spielt diese Reaktion jedoch keine

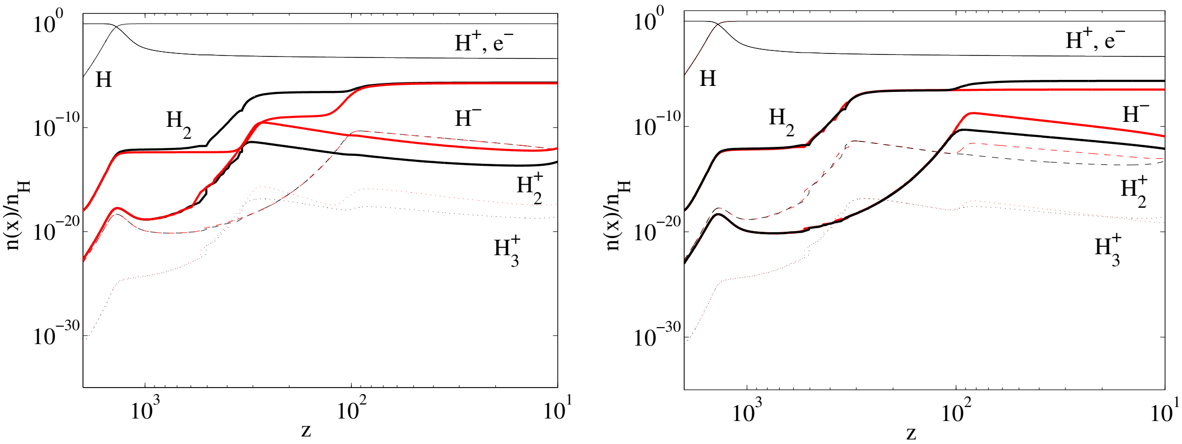


Abbildung 2.6: Vergleich der chemischen Entwicklung des Universums für das gesamte Netzwerk (schwarz) mit dem selben Netzwerk bis auf das Fehlen einer Reaktion (rot). Im linken Bild fehlt die Reaktion $H^+ + H \rightarrow H_2^+ + \nu$ und im rechten diese Reaktion $H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$.

Rolle mehr. Die Dichte des molekularen Wasserstoffs ist nun genau so groß, als wäre die Reaktion dem Netzwerk zugehörig. Hier ist nun der H^--Kanal ($H^- + H \rightarrow H_2 + e^-$) wichtig. Für $z < 100$ produziert dieser die meisten H_2-Moleküle, wie im rechten Bild der Abbildung 2.6 zu sehen ist. Bei größeren Rotverschiebungen ist diese Reaktion nicht wichtig, da die Photonen der Hintergrundstrahlung diese H^--Ionen zerstören.
Bilden sich dann in der weiteren Entwicklung des Universums die ersten Objekte wie z.B. kollabierende Wolken und sind die Dichten in ihnen hoch genug, dann werden die Wasserstoffmoleküle durch die Dreierstöße aus dem letzten Abschnitt gebildet. Der Einfluss dieser Reaktionen wird im folgenden Unterkapitel genauer untersucht.
Um dieses Reaktionsnetzwerk genauer zu studieren, müsste man sich das Verhalten jeder Reaktion eingehender anschauen. Dies geht jedoch über den Rahmen dieser Arbeit hinaus. Um weitere interessante Phänomene zu untersuchen, wie z.B. den Einfluss von Lithium auf die chemische Entwicklung des Netzwerkes, muss die Entwicklung der Gastemperatur selbstkonsistent mitgerechnet werden, was sicherlich ein zukünftiges Ziel ist.

2.4 Eigenschaften primordialer Netzwerke

Um die Studien über das primordiale Wasserstoffnetzwerk zu vertiefen, möchte ich in diesem Abschnitt gesondert auf die zeitliche Entwicklung der Chemie in Abhängigkeit von den Parametern Anfangsdichten und Temperatur eingehen. Die Rechnungen starten immer mit einem vollionisierten Wasserstoffsystem, d.h. bei vorgegebener Gesamtdichte n_{ges} erhalten wir für die H^+-Dichte $n_{\mathrm{H}^+} = n_{\mathrm{ges}}$. Alle weiteren Teilchenzahldichten sind $n(\mathrm{x}) = n_{\mathrm{ges}} \cdot \mathit{10}^{-\mathit{10}}$ für x = H, H^-, H_2^+, H_3^+ und H_2. Die Gesamtdichte wird nun über einen Bereich von $n_{\mathrm{ges}} = 1..10^{22}$ cm^{-3} in fünfzig Schritten variiert. Für die Elektronendichte erhält man aus Gründen der Ladungserhaltung $n_{\mathrm{e}^-} = n_{\mathrm{H}^+} + n_{\mathrm{H}_2^+} + n_{\mathrm{H}_3^+} - n_{\mathrm{H}^-}$. Die Temperatur wird in ca. zwanzig Schritten von 10 K auf 30000 K erhöht, wobei hier gilt $T_{rad} = T_{gas}$. Für jede Gesamtdichte darf sich das chemische System an jedem Temperaturpunkt solange entwickeln, bis es im Gleichgewicht ist. Dieses ist erreicht, wenn die relative Dichtenänderung für jede Spezies, deren Teilchenzahldichte größer als $n_{\mathrm{ges}} \cdot 10^{-12}$ ist, kleiner als 10^{-6} wird. Ist das System nach einer Hubbelzeit ($\approx 10^{18}$ s) noch nicht im Gleichgewicht, wird die Rechnung zu dieser Zeit ebenfalls beendet. In Abbildung 2.7 sind die Zeit, die das Netzwerk braucht, um ins Gleichgewicht zu laufen, und die relativen Häufigkeiten von H^+ und H_2 zum Zeitpunkt, wenn das chemischen

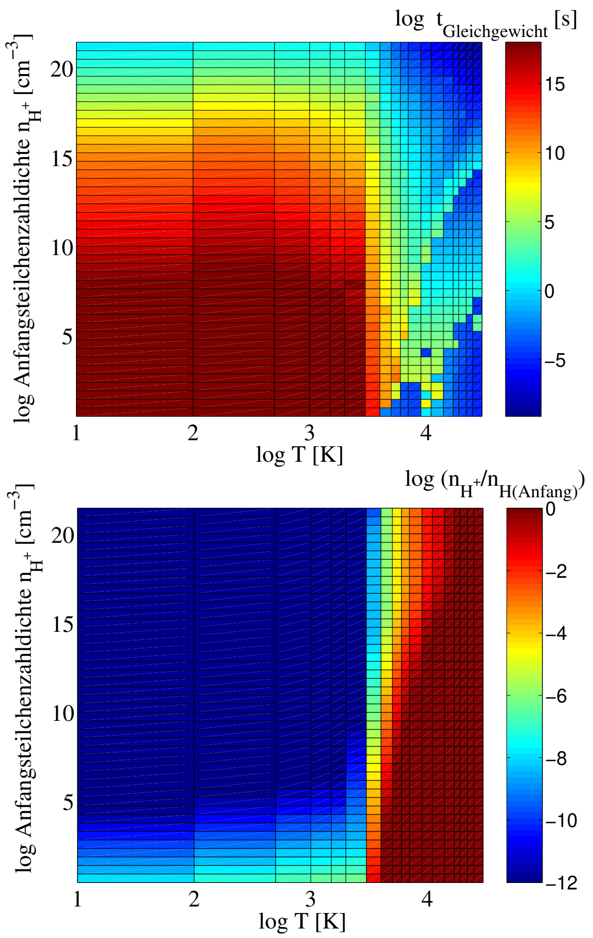


Abbildung 2.7: Logarithmisch aufgetragen sind die Zeit bis zur Einstellung des chemischen Gleichgewichts (**oben links**) und die relativen Häufigkeiten von H^+ (**unten links**) und H_2 (**oben rechts**)in Abhängigkeit von der Temperatur und Ausgangsteilchenzahldichte von H^+. n_{H} ist die gesamte Dichte aller wasserstoffenthaltenden Spezies.

Gleichgewicht erreicht ist, dargestellt.
Die Ergebnisse bestätigen die Erwartung, dass mit zunehmender Dichte und ebenfalls mit steigender Temperatur die Gleichgewichtszeit abnimmt. Die Teilchen wechselwirken

viel öfter und so kann sich das chemische Gleichgewicht schneller einstellen. Plausibel ist ebenfalls die geringe Entstehung von H_2 bei hohen Temperaturen und niedrigen Teilchenzahldichten, da bei hohen Temperaturen weniger atomarer Wasserstoff vorliegt und dieser im Dreierstoßprozess, welcher bei hohen Dichten am effiktivsten ist, zum Aufbau von H_2 gebraucht wird. Dagegen entsteht viel H_2 bei niedrigen Temperaturen und hohen Dichten. Für eine Gesamtteilchenzahldichte von $3.0 \cdot 10^{20}$ cm^{-3} und für die beiden Temperaturen $T_1 = 10$ K und $T_2 = 3000$ K sind in Abbildung 2.8 die zeitlichen Dichteänderungen gezeigt. Interessant ist nun der Vergleich mit den Dichteverläufen aus

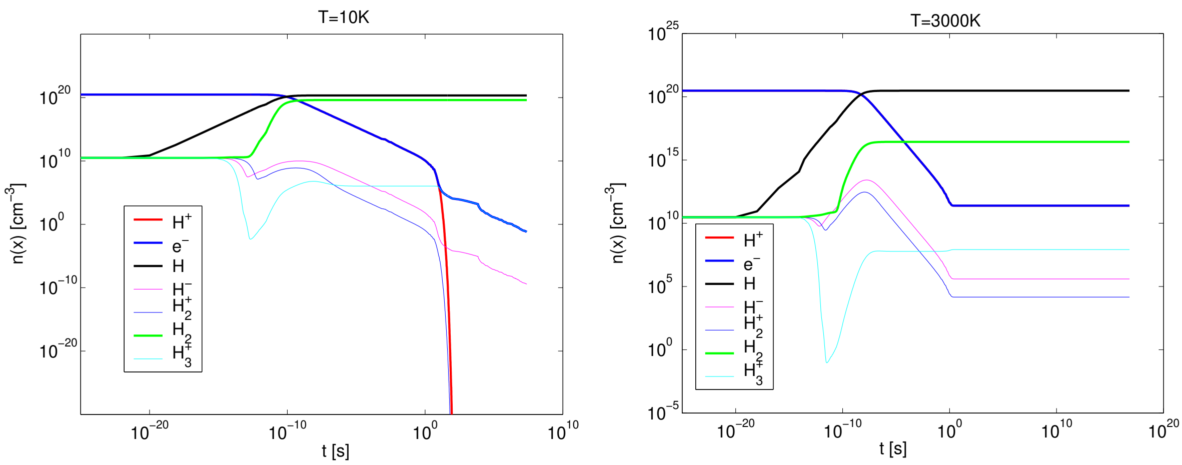


Abbildung 2.8: Zeitliche Entwicklungen aller Wasserstoffspezies für die Temperaturen 10 K (**links**) und 3000 K (**rechts**) mit den Dreierstoßreaktionen und deren Rückreaktionen.

Abbildung 2.9. Diese wurden mit dem gleichen chemischen Netzwerk, bloß ohne die

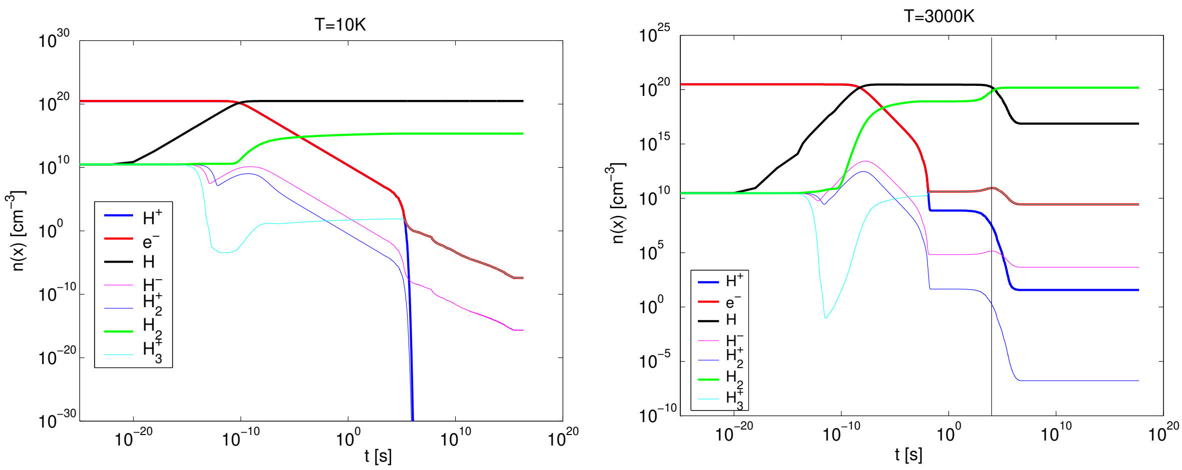


Abbildung 2.9: Zeitliche Entwicklungen aller Wasserstoffspezies für die Temperaturen 10 K (**links**) und 3000 K (**rechts**) ohne Dreierstoßreaktionen.

zwei Dreierstoßreaktionen und die dazugehörigen Rückreaktionen berechnet. Bei diesen

hohen Dichten, bei denen gerade diese Dreierstoßreaktionen wichtig sind, ist die H_2 Bildung stark von diesen Reaktionen abhängig. Bei 10 K ermöglichen diese vier Reaktionen eine relativ schnelle H_2 Produktion. Bereits nach 10^{-10} ist die maximale Ausbeute an molekularem Wasserstoff erreicht. Ohne diese Dreierstoßreaktionen entsteht sogar nach Ablauf einer Hubbelzeit nur ein Bruchteil an H_2 Teilchen. Bei 3000 K sind dafür die Rückreaktionen der Dreierstoßprozesse so dominant, dass nun die Entstehung von molekularem Wasserstoff unterdrückt wird.
Zum Schluss sollen noch die Reaktionszeitskalen untersucht werden, um das Erreichen des chemischen Gleichgewichtes für die zwei Beispiele in Abbildung 2.8 besser zu verstehen. Die Zeitskala der Reaktion $\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H} \rightarrow \mathrm{H}_2 + \mathrm{H}$ mit der Raktionsrate k_{H_2} (siehe Anhang A) berechnet sich wie folgt

$$\tau_{\mathrm{H}_2} = \frac{1}{k_{\mathrm{H}_2}(T) n_{\mathrm{H}}^2} \tag{2.15}$$

und ist für den im vorher verwendeten Temperatur- und Dichtebereich in Abbildung 2.10 dargestellt. Die Zeitskala dieser H_2 bildenden Reaktion liegt für eine Wasserstoffteilchen-

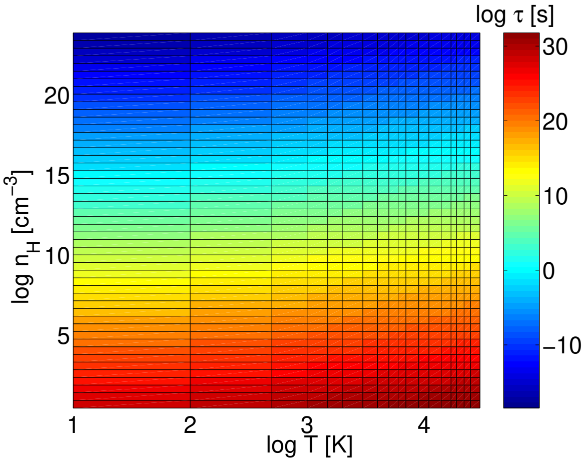


Abbildung 2.10: Logarithmisch aufgetragen ist die Zeitskala der Reaktion $\mathrm{H} + \mathrm{H} + \mathrm{H} \rightarrow \mathrm{H}_2 + \mathrm{H}$ in Abhängigkeit von der Gastemperatur und Teilchenzahldichte von atomarem Wasserstoff.

zahldichte von 10^{20} cm^{-3} und einer Temperatur von $T_1 = 10$ K (bzw. $T_2 = 3000$ K) bei $\approx 10^{-10}$ s (10^{-8} s). Der Vergleich dieser Werte mit der Zeit, zu der die Bildung von H_2 (grüne Kurve) in Abbildung 2.8 abgeschlossen ist, zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Jedoch wird die Zeit, die das Netzwerk für das Erreichen des chemischen Gleichgewichtes braucht, von einer anderen Reaktion bestimmt. Aus Abbildung 2.7 kann man ablesen, dass die so genannte Gleichgewichtszeit für die obige Dichte und Temperaturen bei ungefähr 100 s liegt und damit viel länger als die Bildungszeit des molekularen Wasserstoffs ist. Es ist diese Reaktion $\mathrm{H}^+ + \mathrm{e}^- \rightleftharpoons \mathrm{H} + \nu$, die nun die Zeitskala bestimmt. Wir wählen die Hinreaktion, da Wasserstoff aufgebaut wird, und erhalten mit $n_{\mathrm{H}^+} \approx n_{\mathrm{e}^-}$ folgende Formel für die Reaktionszeitskala

$$\tau_{\mathrm{Hin}} = \frac{1}{k_{\mathrm{Hin}}(T) n_{\mathrm{H}^+}} \qquad \text{mit} \qquad k_{\mathrm{Hin}} = 3.6 \cdot 10^{-12} \, (T/300)^{-0.75} \, \mathrm{cm}^3 \mathrm{s}^{-1} \; . \tag{2.16}$$

Für eine H^+-Teilchenzahldichte von $3.0 \cdot 10^{20}$ cm^{-3} sind die Zeitskalen $\tau_{\mathrm{Hin}}(T = 10K) = 7.2 \cdot 10^{-11}$ s und $\tau_{\mathrm{Hin}}(T = 3000K) = 5.2 \cdot 10^{-9}$ s. Dies sind genau die Zeiten, zu denen H^+ und e^- sichtbar abgebaut werden (blaue Linie). Nun, da die Dichten dieser Teilchensorten kleiner werden, nimmt die Reaktionszeitskala zu, da diese umgekehrt proportional zur Dichte ist. Deswegen entwickeln sich die Systeme immer weiter. Dies passiert so lange, bis (z.B. bei T=10 K) die Dichte unter die Abbruchschranke von $n_{\mathrm{ges}} \cdot 10^{-12}$ fällt oder (wie bei T=3000 K) eine andere Reaktion einsetzt und das System stabilisiert. Möchte man einen Gefühl dafür bekommen, wie lange das System braucht, bis es ins Gleichgewicht läuft, ohne dass man sich die Zeitskalen jeder einzelnen Reaktion genauer anschauen muss, dann sind die Plots der Art, wie sie in Abbildung 2.7 dargestellt sind, sehr aufschlußreich.

3 Analytische Modelle stationärer Akkretionsscheiben

Mit dem Ziel die primordiale Chemie in Akkretionsscheiben zu untersuchen, müssen wir uns zuerst mit den Grundlagen zur Beschreibung von Scheiben befassen. In diesem Kapitel werden die grundlegenden Gleichungen für die Behandlung von massearmen und selbstgravitierenden Scheiben besprochen. Besonderer Wert wird auf eine möglichst einfache Beschreibung der physikalischen Zusammenhänge gelegt, um die dann folgenden Untersuchungen zur Chemie in den Scheiben zu erleichtern. Die so erhaltenen analytischen Lösungen geben erste Eindrücke über das Verhalten der Scheibengrößen wie z.B. Flächendichte oder Temperatur, sind aber nicht vielmehr als analytische Größenordnungs-Abschätzungen, die in den folgenden Kapiteln durch verbesserte numerische Rechnungen ersetzt werden.
Aufgrund der Gestalt des astrophysikalischen Objekts fällt die Wahl des Koordinatensystems natürlicherweise auf ein zylindrisches (s, φ, z), dessen Ursprung im Zentrum des Zentralkörpers (siehe Abbildung 3.1) liegt.

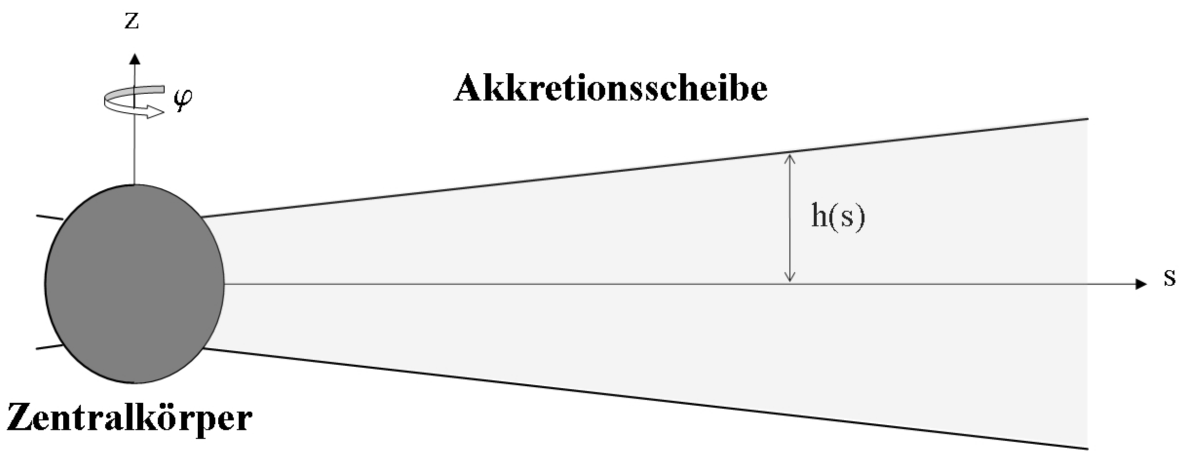


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung einer Akkretionsscheibe.

Um das Problem zu vereinfachen, werden folgende Annahmen gemacht:

- Die Reduzierung um eine Dimension erfolgt durch die Annahme einer rotationssymmetrischen Scheibe. In diesem Fall gilt $\partial/\partial\varphi \equiv 0$. Lokale Störungen wie beispielsweise Spiralarme, die unserer Galaxie ihr charakteristisches Aussehen verleihen, können deshalb nicht in azimutaler Richtung aufgelöst werden.

- Es ist eine Spiegelsymmetrie zur Zentralebene vorhanden. Dies führt zur Definition der Größe $h(s)$, die die halbe Dicke der Scheibe am Radius s darstellt.

- Zudem ist die Scheibe geometrisch dünn. Dies bedeutet, dass die Höhe $h(s)$ klein bezüglich des Radiuses ist: $h(s)/s \ll 1$.
  Da in dünnen Scheiben die Druck- und Temperaturgradienten hauptsächlich in vertikaler Richtung ausgerichtet sind, der Material- und Drehimpulstransport aber in radialer Richtung vonstatten geht, entkoppelt die vertikale von der radialen Scheibenstruktur. In z-Richtung kann deshalb im Rahmen der Einzonennäherung über die entsprechenden Gleichungen integriert werden und man erhält einen Satz von Gleichungen für die Mittelwerte. Somit wird die Scheibenstruktur in vertikaler Richtung ebenfalls nicht auflöst.
  Die berechnete radiale Scheibenstruktur und die Einzonennäherung ergeben zusammen die so genannte 1+1D-Lösung.

- Die Scheibe soll stationär sein, d.h., alle zeitlichen Ableitungen verschwinden.

Eine umfassende Beschreibung der Akkretionscheibentheorie findet sich in [Frank02].
In dieser Arbeit werden folgende drei Akkretionsscheibentypen, wie sie in [Duschl00] behandelt werden, betrachtet:

- **Non-SelfGravitating (NSG)**
  Bei einer nicht-selbstgravitierenden Scheibe ist die von der Scheibenmasse ausgehende Anziehungskraft gegenüber der der Masse des Zentralobjektes nicht zu berücksichtigen.

- **Keplerian SelfGravitating (KSG)**
  In der Kepler selbstgravitierenden Scheibe ist die Eigengravitation in vertikaler Richtung wesentlich. Jedoch besitzt diese Scheibenart ein Keplerrotationsprofil und damit ist die Selbstgravitation in radialer Richtung gegenüber der gravitativen Anziehung durch die Zentralmasse zu vernachlässigen.

- **Fully SelfGravitating (FSG)**
  Die voll selbstgravitierende Scheibe spürt in jeder Richtung im Wesentlichen nur die Gravitationskraft der eigenen Masse.

3.1 Grundlegende Gleichungen

3.1.1 Massenerhaltung

Zur Vereinfachung der in den nächsten Unterkapiteln folgenden hydrodynamischen Gleichungen wird zuerst die so genannte Einzonennäherung eingeführt. Die Ableitungen nach z werden durch den Differenzenquotienten

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{x(h) - x(0)}{h - 0} \tag{3.1}$$

ersetzt. Die physikalischen Größen wie beispielsweise der Druck oder die Temperatur sollen am Scheibenrand $z = h$ verschwinden, so dass man folgende Zusammenhänge bekommt

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{h} \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial x}{\partial z} = \frac{-x(0)}{h} \,. \tag{3.3}$$

Die Flächendichte $\Sigma(s,t)$ der Scheibe kann nun wie folgt definiert werden

$$\Sigma(s,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \rho(s,z,t)dz = \int\limits_{-h}^{h} \rho(s,z,t)dz = 2h\overline{\rho}(s) \,, \tag{3.4}$$

wobei dann $\overline{\rho}(s) = \rho(s, z = 0)$ die mittlere Dichte in vertikaler Richtung ist.
Nun betrachten wir den Massenfluss durch einen beliebigen Ring unserer Scheibe. Vernachlässigt man den vertikalen Masseneinfall, kann die folgende Kontinuitätsgleichung hergeleitet werden [Frank02].

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{1}{s}\frac{\partial (s\Sigma\, v_s)}{\partial s} = 0 \tag{3.5}$$

Da im stationären Fall $\Sigma(s) = \text{const}$ ist, vereinfacht sich (3.5) und man erhält folgende Gleichung, die die Massenflussrate $\dot{M}$ beschreibt

$$\dot{M} = 2\,\pi s\Sigma\,(-v_s) = \text{const}\,. \tag{3.6}$$

Wählt man eine positive Massenflussrate, dann ist v_s kleiner als null und man muss ein negatives Vorzeichen eingeführen.

3.1.2 Drehimpulserhaltung

Gibt es keine zusätzlichen Drehimpulsquellen oder -senken, dann ist die Drehimpulserhaltung gegeben durch

$$s\frac{\partial}{\partial t}(\Sigma s^2\omega) + \frac{\partial}{\partial s}(s\Sigma v_s s^2\omega) = \frac{1}{2\pi}\frac{\partial G}{\partial s}\,. \tag{3.7}$$

Hierbei ist $G(s,t) = 2\pi s\nu\Sigma s^2(\partial\omega/\partial s)$ das Drehmoment, welches auf dem Ring am Scheibenradius s aufgrund der differentiellen Rotation wirkt [Frank02] und ν die kinematische Viskosität. Integriert man die Drehimpulsgleichung (3.7) nach s, erhält man den folgenden Ausdruck für stationäre Scheiben:

$$-\frac{\dot{M}}{2\pi}s^2\omega = s\nu\Sigma s^2(\partial\omega/\partial s) + C\,. \tag{3.8}$$

Die Integrationskonstante C kann dabei bestimmt werden, wenn man annimmt, dass der Übergang von der Scheibenrotation $\omega(s)$ auf die (langsamere) des Zentralobjekts innerhalb einer radial vernachlässigbaren Randschicht passiert. Dann hat man an praktisch derselben Stelle die Rotationsfrequenz der Scheibe $\omega(s_\mathrm{i})$ und ihr Maximum mit $\partial\omega(s_\mathrm{i})/\partial s = 0$. In unmittelbarer Nähe des Zentralobjekts wird die Scheibe immer nichtselbstgravitierend sein, d.h. $\omega(s_\mathrm{i}) = \omega_\mathrm{k}(s_\mathrm{i})$. Erlaubt man - bei größeren Radien - nun noch eine Abweichung vom keplerschen Verlauf der Winkelgeschwindigkeit und beschreibt diesen durch einen Parameter ξ mit $\frac{\partial\omega}{\partial s} = -\frac{3}{2}\xi\frac{\omega}{s}$, so bekommt man

$$\nu\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi\xi}\left[1 - \frac{s_\mathrm{i}^2\omega_\mathrm{k}(s_\mathrm{i})}{s^2\omega}\right]\,. \tag{3.9}$$

3.1.3 Hydrostatisches Gleichgewicht

Unter der Annahme, dass alle Kräfte in vertikaler Richtung stationär sind, stellt sich in dieser Richtung ein hydrostatisches Gleichgewicht ein. Somit entspricht die durch Druckänderung entstehende Kraft der vertikalen Gravitationskraft

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -\rho g_\mathrm{z}\,. \tag{3.10}$$

In der Einzonennäherung vereinfacht sich die linke Seite der obigen Gleichung zu

$$\frac{\partial P}{\partial z} \approx \frac{-P}{h} = \frac{-\rho c_\mathrm{s}^2}{h} \approx \frac{-\Sigma c_\mathrm{s}^2}{2h^2}\,, \tag{3.11}$$

wobei wir eine isotherme Schallgeschwindigkeit $c_\mathrm{s} = \sqrt{P/\rho}$ annehmen. Die Form der rechten Seite wird dadurch bestimmt, ob die Scheibe in vertikaler Richtung selbstgravitierend ist oder nicht.

NSG-Scheiben

Wird das Gravitationspotenzial alleine durch die Zentralmasse verursacht, erhält man für die Schwerebeschleunigung in Richtung der räumlichen Polarkoordinate $r^2 = s^2 + z^2$

$$|\vec{g_r}| = \frac{GM_*}{r^2}|\vec{e_r}| = \frac{GM_*}{s^2+z^2} \approx \frac{GM_*}{s^2}\,. \tag{3.12}$$

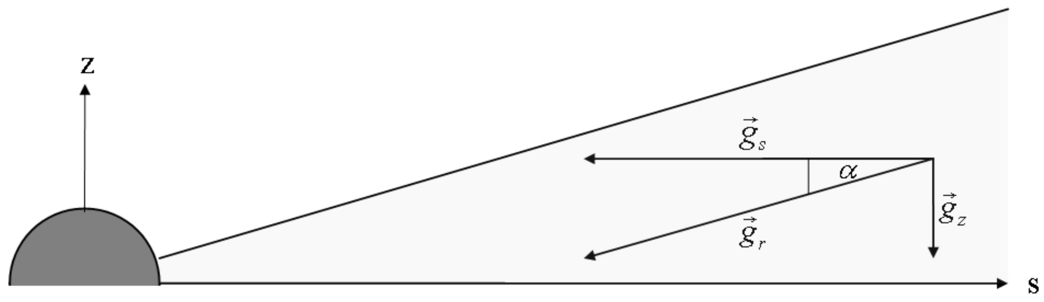


Abbildung 3.2: Grafische Darstellung der Komponenten der Schwerebeschleunigung.

Hieraus ergeben sich für die radiale und vertikale Komponente der Gravitationsbeschleunigung folgende Gleichungen

$$|\vec{g_s}| = |\vec{g_r}|cos(\alpha) = |\vec{g_r}|\frac{s}{r} \approx \frac{GM_*}{s^2} = \frac{v_\varphi^2}{s} \tag{3.13}$$

und

$$|\vec{g_z}| = |\vec{g_r}|sin(\alpha) = |\vec{g_r}|\frac{z}{r} \approx \frac{GM_*}{s^2}\frac{h}{s} \ . \tag{3.14}$$

Aus Gleichung (3.13) erhalten wir die azimutale Keplergeschwindigkeit

$$v_\varphi^2 = \frac{GM_*}{s} = \omega^2 s^2 \ . \tag{3.15}$$

Die Kombination der Gleichungen (3.10) und (3.14) ergibt zusammen mit (3.13)

$$\rho g_z = \rho|\vec{g_z}| \approx \frac{\Sigma}{2h}\frac{GM_*}{s^2}\frac{h}{s} = \frac{\Sigma}{2}\frac{v_\varphi^2}{s^2} \, . \tag{3.16}$$

Diesen Ausdruck in (3.11) eingesetzt, bekommt man den gesuchten Zusammenhang für das Verhältnis h/s.

$$\frac{\Sigma c_\mathrm{s}^2}{2h^2} = \frac{\Sigma}{2}\frac{v_\varphi^2}{s^2} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{h}{s} = \frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi} \tag{3.17}$$

FSG-Scheiben

Ausgangspunkt für dieses Scheibenmodell ist die Schwerebeschleunigung in vertikaler Richtung. Im Gegensatz zur nicht-selbstgravitierenden Akkretionsscheibe wird jetzt die Eigengravitation wichtig. Unter der Annahme, dass unsere Scheibe eine unendlich ausgedehnte dünne Platte ist, ist der Betrag der gravitativen Beschleunigung in vertikaler Richtung (siehe [Paczynski78])

$$|g_\mathrm{z}| = \left|-\frac{d\phi}{dz}\right| = 4\pi G \int\limits_0^z \rho dz = 4\pi G\rho h \, . \tag{3.18}$$

Somit erhalten wir zusammen mit (3.10)

$$P = \pi G \Sigma^2 . \tag{3.19}$$

Die Masse, die die Scheibe bis zum Radius s enthält, wird durch

$$M_D(s) = \int_0^s 2\pi s \Sigma ds \approx \pi s^2 \Sigma(s) \tag{3.20}$$

approximiert. Hierbei wird angenommen, dass die Masse des äußersten Ringes (sprich des Ringes am Radius s) den größten Teil der Scheibenmasse darstellt, da die Ringfläche mit s^2 ansteigt. Deshalb wird in der obigen Gleichung die Flächendichte am Radius s $\Sigma(s)$ gewählt. Dies gilt, wenn die Flächendichte zum Zentralobjekt hin nicht schneller ansteigt, als s^2 abnimmt, was im Allgemeinen der Fall ist. Um die Poissongleichung unabhängig von der globalen Flächendichteverteilung zu lösen, wird folgende Monopol-Näherung gemacht: die zuvor berechnete Scheibenmasse entspricht der Masse einer Kugel, für die die Lösung der Poissongleichung wie folgt lautet

$$v_\varphi^2 \approx \frac{GM_D}{s} = G\pi s \Sigma . \tag{3.21}$$

Die Rotationsfrequenz und ihre radiale Ableitung sind gegeben durch

$$\omega = \frac{v_\varphi}{s} \quad \text{und} \quad \frac{\partial \omega}{\partial s} = -\frac{3}{2}\xi \frac{\omega}{s} . \tag{3.22}$$

Hierbei beschreibt das ξ die Abweichung von der Keplerrotation und ist für nicht-selbstgravitierende und Kepler selbstgravitierende Scheiben exakt eins. Sind die Akkretinsscheiben in radialer Richtung selbstgravitierend, wird ξ ebenfalls eins gesetzt. Der Fehler des Ergebnisses wird hauptsächlich durch das Lösen der Poissongleichung mit der obigen recht groben Näherung verursacht. Der Fehler, der gemacht wird, wenn ξ gleich eins gesetzt wird, ist deshalb zu vernachlässigen. Die Beschreibung des Problems wird durch diese Annahme jedoch erheblich vereinfacht.
Die Gleichung (3.22) zusammen mit (3.19) und der isothermen Schallgeschwindigkeit ergibt

$$\frac{h}{s} = \frac{1}{2}\left(\frac{c_s}{v_\varphi}\right)^2 . \tag{3.23}$$

KSG-Scheiben
Bei der Keplerscheibe gibt es auf Grund der großen Zentralmasse ($M_* >> M_D$) nur Eigengravitation in vertikaler Richtung. Somit bekommen wir in diesem Fall die Keplergeschwindigkeit aus (3.13) und für das hydrostatische Gleichgewicht gilt die Gleichung (3.19). Wir erhalten

$$P = \pi G \Sigma^2 = \rho c_s^2 = \frac{\Sigma}{2h} c_s^2 . \tag{3.24}$$

Die vertikale Beschleuningung, verursacht durch die Zentralmasse, wird bei diesem Scheibentyp vernachlässigt ($M_D \gg M_* \frac{h}{s}$). Weitere Umformungen ergeben

$$c_\mathrm{s}^2 = 2\pi h G \Sigma = \frac{2hGM_D}{s^2} = \frac{2h}{s}\frac{M_D}{M_*}v_\varphi^2$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{h}{s} = \frac{1}{2}\frac{M_*}{M_D}\left(\frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi}\right)^2 . \tag{3.25}$$

Zusammenfassende Darstellung
Definiert man die Parameter A und B wie folgt

$$(A,B) = \begin{cases} (1,0) & : \quad NSG \\ (1,1) & : \quad KSG \\ (0,1) & : \quad FSG \end{cases} ,$$

findet man diese, alle drei Scheibentypen beschreibende, Formeln für das Verhältnis h/s

$$\frac{h}{s} = \left(\frac{1}{2}\right)^B \left(\frac{M_*}{M_D}\right)^{AB} \left(\frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi}\right)^{1+B} \tag{3.26}$$

und die Azimutalgeschwindigkeit

$$v_\varphi^2 = \frac{GM_*^A M_D^{1-A}}{s} . \tag{3.27}$$

3.1.4 Erhaltung der Energie

Man kann zeigen [Frank02], dass für die in der Scheibe durch viskose Reibung dissipierte mechanische Energie pro Einheitsfläche $D(s)$ folgender Zusammenhang gilt

$$D(s) = \frac{1}{2}\nu\Sigma(s\omega')^2 . \tag{3.28}$$

Ist die Zentraltemperatur T_c sehr viel größer als die Oberflächentemperatur T_eff und erfolgt der Strahlungstransport nur in vertikaler Richtung und ist dabei radiativ, erhält man

$$\frac{4\sigma}{3\tau}T_c^4 = D(s) = \frac{9}{8}\xi^2\nu\Sigma\,\omega^2 . \tag{3.29}$$

Für die optische Tiefe des Gases τ gilt im optisch dicken Regime

$$\tau = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_\mathrm{R} , \tag{3.30}$$

wobei κ_R das Rosselandmittel ist.

3.1.5 Materialfunktionen

Die Zustandsgleichung

Da die Dichten in den Akretionsscheiben relativ gering sind, verhalten sich die Atome und Moleküle im Gas wie Teilchen eines idealen Gases. Die Beschreibung des Gaszustandes erfolgt deshalb mit dem idealen Gasgesetz

$$P = \frac{\rho R T}{\mu} . \tag{3.31}$$

P ist der Gasdruck, R die universelle Gaskonstante und μ das mittlere Molekulargewicht, welches von der chemischen Zusammensetzung und dem Ionisationsgrad des Gases abhängt. Der Strahlungsdruck wird bei den analytischen Betrachtungen vernachlässigt, da er bei den erwarteten geringen Temperaturen eine untergeordnete Rolle spielt.

Die Opazität

Die Extinktionskoeffizenten κ sind entweder in Form von Tabellen oder als analytische Approximationen, die stückweise für die Bereiche aus der Tabelle 3.1 an die Tabellenwerte angepaßt wurden, verfügbar. Die nach Rosselland gemittelte Opazität ist sehr gut durch die Formel

$$\kappa = \kappa_{\mathrm{R}} = \kappa_0 \, \rho^c \, T^d \tag{3.32}$$

approximiert, wobei für die Vorfaktoren und Koeffizienten für die verschiedenen Teilchenbereiche die Werte aus [Gail] genommen wurden. Diese Fitformel gilt im Temperaturbereich von 10 K bis 100000 K. In diesem Kapitel können nur POP-I-Scheiben analytisch gerechnet werden, da diese Interpolationsformeln nur für staubreiches Material verfügbar sind.

Bereich	κ_0	c	d
Staub mit Eismänteln	$2.0 \cdot 10^{-4}$	0	2
Eisverdampfung	10^{16}	0	-7
Staubabsorption	0.1	0	0.5
Staubverdampfung	$2.0 \cdot 10^{81}$	1	-24
Moleküle	10^{-8}	2/3	3
H^--Absorption	10^{-36}	1/3	10
gf- und ff-Absorption der Atome	$1.5 \cdot 10^{20}$	1	-2.5
e^--Streuung	0.348	0	0

Tabelle 3.1: Vorfaktor und Koeffizienten der Opazitäten für die verschiedenen Teilchenbereiche. Die Abkürzungen gf und ff stehen für gebunden-frei und frei-frei.

Die Viskosität

Viskose Reibung ermöglicht in Akkretionsscheiben den Drehimpulstransport von innen nach außen. Da die molekulare Viskosität um Größenordnungen zu klein ist, ein solcher Akkretionsprozess würde länger als die Hubbelzeit benötigen, wird eine turbulente Viskosität als Ursache der Reibung herangezogen. Die Viskositär ν kann dann als Produkt der maximalen turbulenten Längenskala $l_{\mathrm{turb}} = \Delta s$ und der maximalen turbulenten Geschwindigkeitsskala $v_{\mathrm{turb}} = \Delta v_\varphi$ geschreiben werden

$$\nu = l_{\mathrm{turb}} v_{\mathrm{turb}} = \Delta s \Delta v_\varphi \,. \tag{3.33}$$

In dieser Arbeit wird für die Bereiche, in denen die Turbulenzgeschwindigkeit subsonisch bleibt, die β-Viskosität und im Falle, dass v_{turb} gleich der Schallgeschwindigkeit ist, eine Viskosität für Scheiben im stoßdissipativen Limes verwendet.
Bei der Beschreibung der turbulenten Reibung durch die β-Viskosität liegt die Reynoldszahl im Bereich der kritischen Reynoldszahl $R_{\mathrm{crit}} \approx 100 - 1000$. Für die Viskosität erhält man mit $v_{\mathrm{turb}} = \sqrt{\beta} v_\varphi < c_{\mathrm{s}}$ und $l_{\mathrm{turb}} = \sqrt{\beta} s$ nach [Duschl00] den Ausdruck

$$\nu^{(\beta)} = \beta s v_\varphi \,, \tag{3.34}$$

wobei $\beta = \frac{1}{R_{\mathrm{crit}}} = 10^{-3} - 10^{-2}$ ist.
Im stoßdissipativen Grenzfall entspricht die turbulente Geschwindigkeit ungefähr der Schallgeschwindigkeit c_{s} und es gilt

$$\Delta v_\varphi = \zeta c_{\mathrm{s}} \tag{3.35}$$

mit dem Faktor ζ der Größenordnung eins. Mit den Annahmen $\Delta s \ll s$ und $\Delta v_\varphi \ll v_\varphi$ ergibt sich dieser Zusammenhang

$$\left| \frac{dv_\varphi}{ds} \right| \approx \frac{\Delta v_\varphi}{\Delta s} \,. \tag{3.36}$$

Zusammen mit

$$\frac{dv_\varphi}{ds} = \frac{d(s\omega)}{ds} = \frac{2-3\xi}{2} \frac{v_\varphi}{s} \tag{3.37}$$

erhält man für das Δs

$$\Delta s = \left| \frac{2-3\xi}{2} \right|^{-1} \frac{s}{v_\varphi} \Delta v_\varphi = \left| \frac{2-3\xi}{2} \right|^{-1} \frac{s}{v_\varphi} \zeta c_{\mathrm{s}} \,. \tag{3.38}$$

Die Viskosität im stoßdissipationsbegrenzten Limes ist damit

$$\nu^{(\mathrm{DL})} = \left| \frac{2-3\xi}{2} \right|^{-1} \frac{s}{v_\varphi} \zeta^2 c_{\mathrm{s}}^2 = \gamma \frac{c_{\mathrm{s}}^2}{\omega} \tag{3.39}$$

$$\text{mit} \qquad \gamma = \left| \frac{2-3\xi}{2} \right|^{-1} \zeta^2 \,.$$

Im Falle von nicht-selbstgravitierenden Akkretionsscheiben kann man, indem man diese aus dem hydrostatischen Gleichgewicht hergeleitete Gleichung

$$\frac{h}{s} = \frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi}$$

in die Gleichung (3.40) einsetzt, die so genannte α-Viskosität $\nu = \alpha c_\mathrm{s} h$ mit $\alpha = \gamma$ eingeführt von Shakura & Sunyaev (1973) ableiten.

Für Scheiben, in denen beide Viskositätsbeschreibungen verwendet werden, müssen die Parameter β und γ so gewählt werden, dass der Übergang zwischen diesen beiden Viskositäten stetig ist. Da β als Kehrwert der kritischen Reynoldszahl definiert ist, liegt sein Wert in den Rechnungen immer zwischen 10^{-3} und 10^{-2}. Eine Bedingung für die Wahl des γ kann aus den folgenden Überlegungen hergeleitet werden. An der Stelle, an der der Viskositätsübergang erfolgt, gilt für die Turbulenzgeschwindigkeit $v_\mathrm{turb} = \sqrt{\beta} v_\varphi = c_\mathrm{s}$ und die beiden Viskositäten können gleichgesetzt werden

$$\nu^{(\beta)} = \beta s v_\varphi \stackrel{!}{=} \gamma \frac{s c_\mathrm{s}^2}{v_\varphi} = \nu^{(DL)}$$

$$\Rightarrow \qquad \beta v_\varphi^2 = \gamma c_\mathrm{s}^2 \,.$$

Setzt man in diese Gleichung die obige Beziehung für die Turbulenzgeschwindigkeit ein, erhält man folgende Bedingung

$$\gamma = 1 \,.$$

Somit ist das γ unabhängig von der genauen Wahl von β festgelegt.

3.1.6 Komplettes System von Gleichungen

Zusammenfassend sind hier alle Gleichungen gemeinsam aufgeführt. Sind die Parameter β und γ, die Zentralmasse M_* und die Massenflussrate $\dot{\mathrm{M}}$ gegeben, dann kann dieses aus zwölf Gleichungen bestehende System für die zwölf Unbekannten an jedem Radius s der Scheibe gelöst werden.

$$\nu\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi\xi} \left[1 - \frac{s_\mathrm{i}^2 \omega_\mathrm{k}(s_\mathrm{i})}{s^2 \omega} \right]$$

$$\rho = \frac{\Sigma}{2h}$$

$$M_D = \pi s^2 \Sigma$$

$$\dot{M} = 2\,\pi s \Sigma\, v_s$$

$$v_\varphi^2 = \omega^2 s^2$$

$$v_\varphi^2 = \frac{GM_*^A M_D^{1-A}}{s}$$

$$\frac{h}{s} = \left(\frac{1}{2}\right)^B \left(\frac{M_*}{M_D}\right)^{AB} \left(\frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi}\right)^{1+B}$$

$$\frac{8\sigma}{3\kappa} T_c^4 = D(s) = \frac{9}{8}\xi^2 \nu \Sigma^2 \omega^2$$

$$\kappa = \kappa_0\, \rho^c\, T^d$$

$$P = \frac{\rho R T}{\mu}$$

$$c_\mathrm{s}^2 = \frac{P}{\rho}$$

$$\nu = \begin{cases} \beta s v_\varphi & \sqrt{\beta} v_\varphi < c_\mathrm{s} \\ \gamma \frac{c_\mathrm{s}^2}{\omega} & \sqrt{\beta} v_\varphi \geq c_\mathrm{s} \end{cases}$$

Um die Randbedingung des inneren Scheibenrandes nicht mitberücksichtigen zu müssen, wird angenommen, dass man immer genügend weit vom Innenradius s_i entfernt ist. Unter dieser Voraussetzung entfällt der zweite Term in der ersten Gleichung.
In den folgenden zwei Abschnitten wird dieses Gleichungssystem für eine protoplanetare und eine milchstraßenartige Akkretionsscheibe gelöst, um einen ersten Eindruck über die Scheibengrößen zu erhalten.

3.2 Protoplanetare Akkretionsscheiben

Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen für protoplanetare Akkretionsscheiben werden in diesem Unterkapitel dargestellt. Diese Scheiben besitzen ein Zentralobjekt mit der Masse unserer Sonne und eine Massenakkretionsrate von $10^{-4}\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$. Es wurden im Rahmen der verwendeten Näherungen selbstkonsistente Lösungen für Radien zwischen 1.0 AE und 10^5 AE für NSG-, KSG- und FSG-Scheiben gefunden.

β	M_*	$\dot{\mathrm{M}}$	s_min	s_max
10^{-2}	$\mathrm{M}_\odot$	$10^{-4}\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$	1.0AE	10^5AE

Variiert wurde das mittlere Molekulargewicht, um die Abhängigkeit der Lösungen von der chemischen Zusammensetzung zu untersuchen. Die Ergebnisse sind für ein vollständig ionisiertes $\mu = 0.5$ (rot) und molekulares $\mu = 2.0$ (blau) Gas in Abbildung 3.3 dargestellt. Auffällig ist, dass die Kurvenverläufe der Scheibengrößen gleich sind, jedoch gibt es für den ionischen Fall bei großen Abständen von der Zentralmasse keine selbstkonsistenten

Lösungen. Ist man also an der genauen Größe dieser Scheiben interessiert, muss die chemische Zusammensetzung bekannt sein. Weiterhin findet man für jede Scheibengröße U ($U = \Sigma, v_s, \rho, T$ etc.) die Abhängigkeit

$$U \propto \mu^r \,. \tag{3.40}$$

Hierbei ist der Koeffizient r für jede Scheibengröße und jedes Scheibenmodell verschieden. Bei der Darstellung der Dichte als Funktion des Radius ist die Verschiebung der Lösungskurven auf Grund unterschiedlicher μ-Werte (die sog. μ-Shift) besonders deutlich.

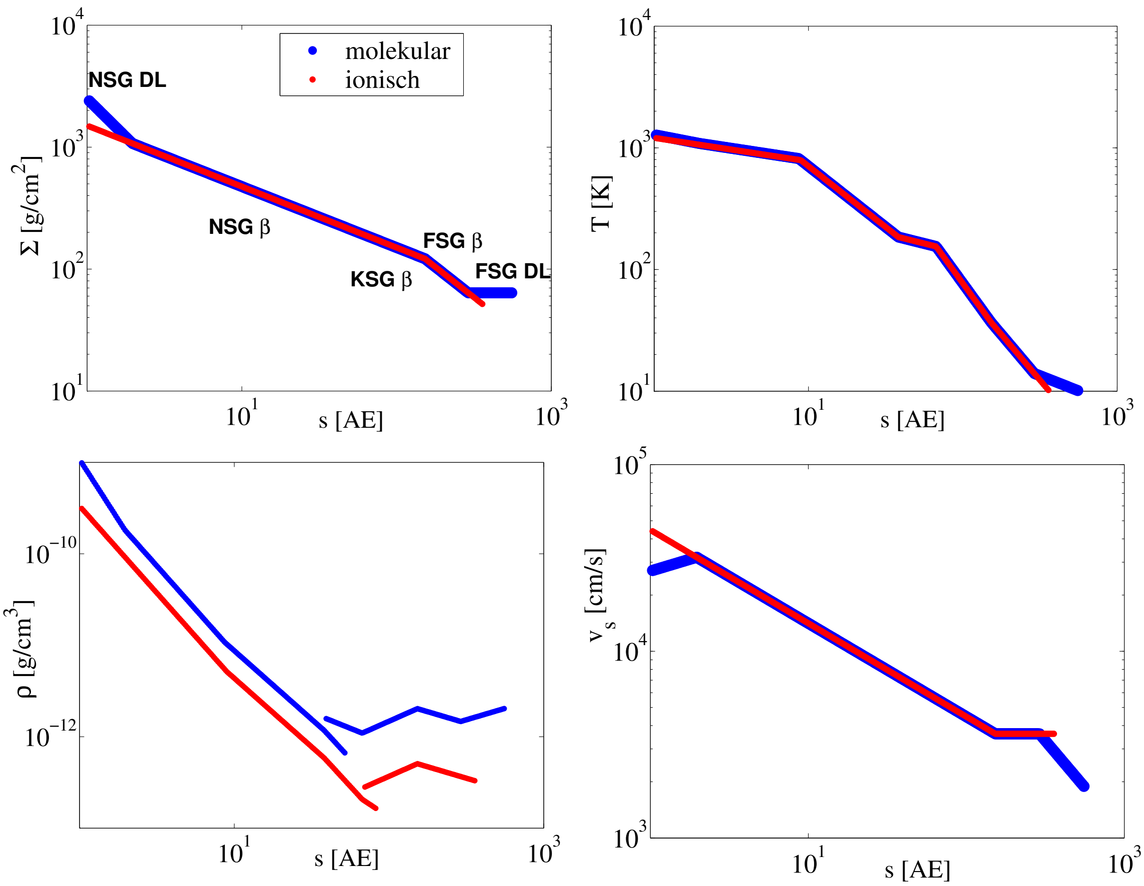


Abbildung 3.3: Berechnete Scheibengrößen von protoplanetaren Akkretionsscheiben als Funktion des Radius. **oben links**: Flächendichte **oben rechts**: Temperatur **unten links**: Dichte **unten rechts**: radiale Driftgeschwindigkeit.

3.3 Milchstraße

Nun wird eine andere Art von Akkretionsscheibe, eine die unserer Milchstraße ähnelt, untersucht. Das Zentralobjekt dieser Scheibe besitzt die Masse von 10^6 Sonnen und die

Masenflussrate beträgt $10^{-1} M_\odot\,yr^{-1}$. In Abbildung 3.4 sind die Lösungen, die zwischen Radien von 10^{-1} pc bis 10^4 pc zu finden sind, abgebildet. Wie man sieht, gibt es in diesem Bereich nur Lösungen für Scheiben im stoßdissipativen Limes.

β	M_*	$\dot{M}$	s_{min}	s_{max}
10^{-2}	$10^6 M_\odot$	$10^{-1} M_\odot\,yr^{-1}$	10^{-1} pc	10^4pc

Auch bei diesem Scheibenbeispiel reichen die Scheiben, die aus molekularem Gas bestehen, weiter in den Raum hinein. Am äußeren Scheibenrand sind die Temperaturen so klein, dass sich das Gas im molekularen Zustand befindet. Bei kleineren Radien, wenn

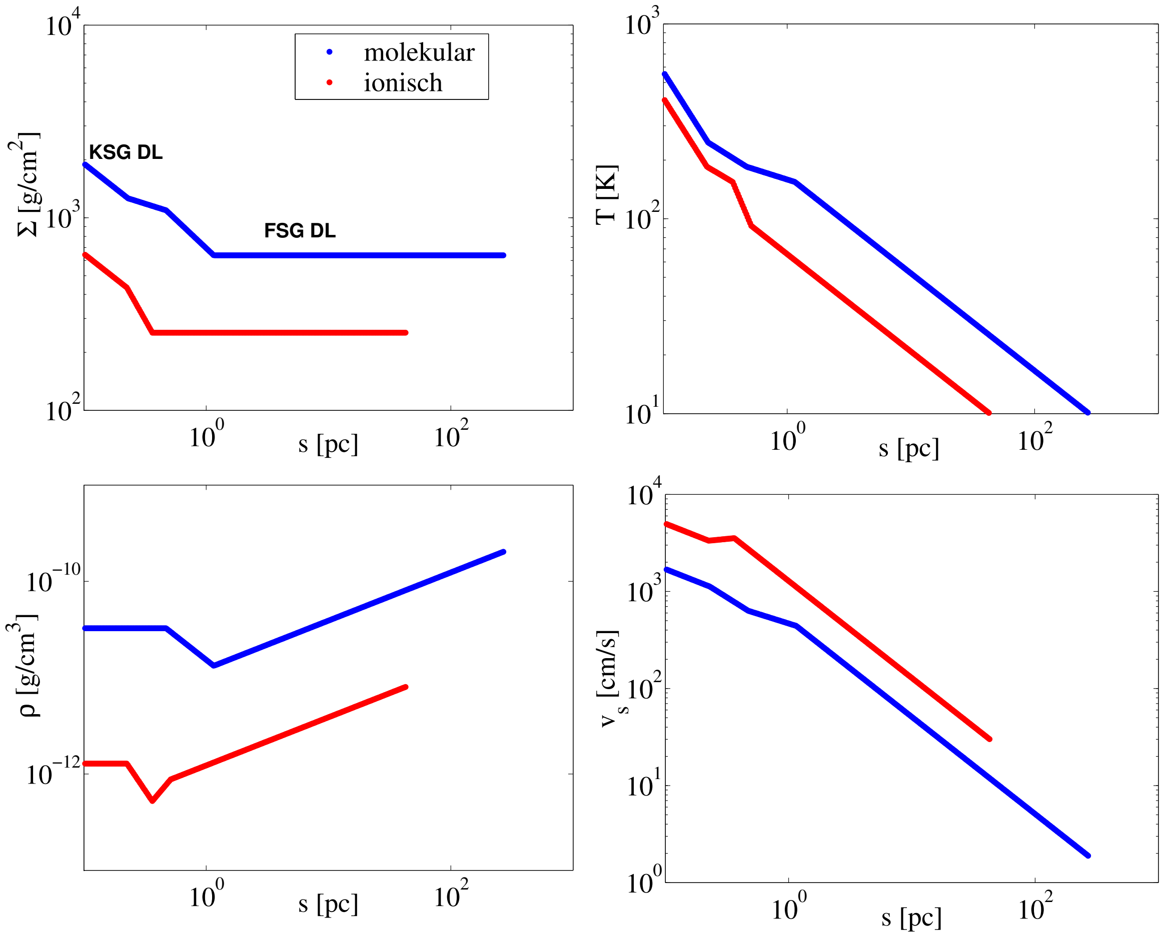


Abbildung 3.4: Berechnete Scheibengrößen von Akkretionsscheiben, die der Milchstraße ähneln, als Funktion des Radius. **oben links**: Flächendichte **oben rechts**: Temperatur **unten links**: Dichte **unten rechts**: radiale Driftgeschwindigkeit.

die Zentraltemperatur deutlich zunimmt, wird die Beschreibung durch ein ionisiertes Gas realistischer. Später, wenn die chemische Entwicklung mitgerechnet wird, kann das

μ aus der jeweiligen chemischen Zusammensetzung des Gases ausgerechnet werden.
Die μ-Shift ist bei dieser Scheibenart für jede dargestellte Scheibengröße deutlich zu erkennen. Ist man an exakten Werten interessiert, muss die Chemie der Scheibe bekannt sein.
Die Knicke in den Lösungskurven werden durch den Übergang zu einem anderen Opazitätsbereich verursacht. Im nächsten Kapitel, in dem numerische Lösungen vorgestellt sind, werden diese Übergange durch Verwendung von Opazitätstabellen anstelle der Fitformeln geglättet. Durch die Benutzung von Opazitätstabellen ist es dann auch möglich, POP-III-Scheiben, in denen dann die primordiale Chemie untersucht wird, zu simulieren.

3.4 Strahlungsdruck

Der Druck innerhalb der Akkretionsscheibe entspricht in den bisherigen Betrachtungen dem Gasdruck aus dem idealen Gasgesetz. Die Annahme, dass die Temperaturen in den in dieser Arbeit untersuchten Scheiben klein genug sind, um den Strahlungsdruck vernachlässigen zu können, soll nun überprüft werden.
Im optisch dicken Regime gilt für den Scheibendruck, bestehend aus dem Gas- und Strahlungsdruck, diese Beziehung

$$P = P_{\mathrm{gas}} + P_{\mathrm{rad}} = \frac{\rho R T}{\mu} + \frac{4\sigma}{3c} T^4 \,. \tag{3.41}$$

Mit den Lösungen der Protoplanetaren Akkretionsscheibe für $\mu = 2.0$ wurden die Drücke für das Gas und die Strahlung als Funktion des Radius berechnet. Sie sind in 3.5 grafisch dargestellt. Im gesamten Radiusbereich ist die Bedingung $P_{\mathrm{rad}} < P_{\mathrm{gas}}$ sehr gut erfüllt.

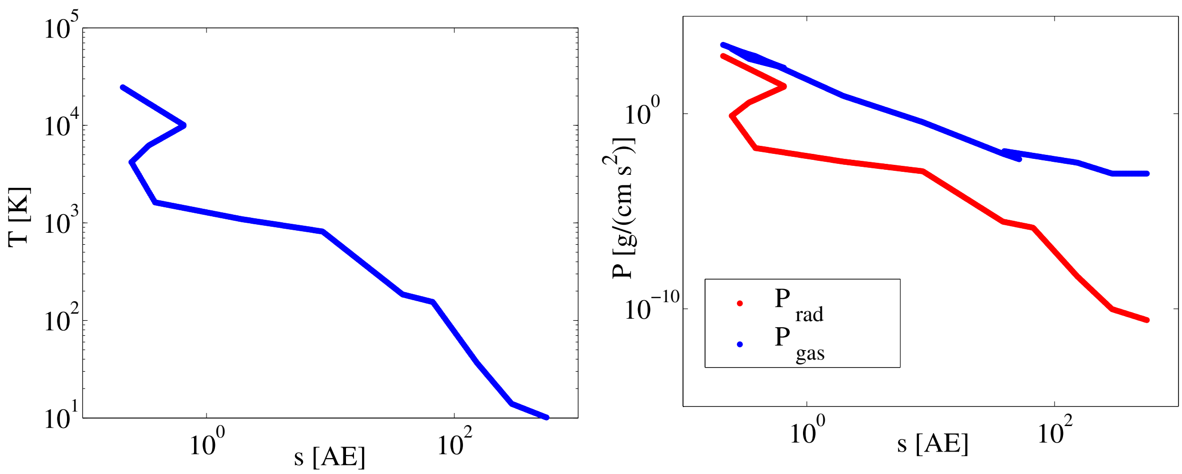
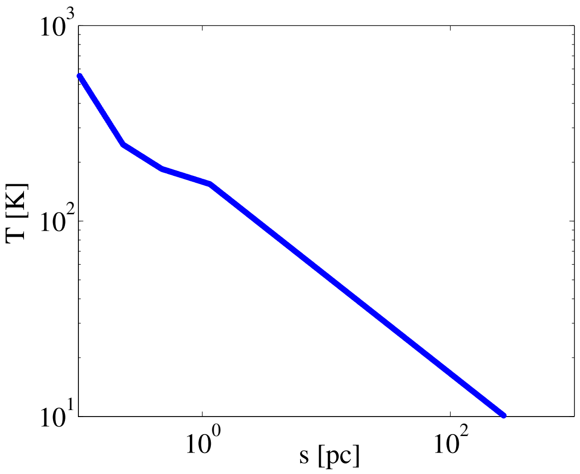


Abbildung 3.5: Temperatur (**links**) und Druck (**rechts**) als Funktion des Radius in protoplanetaren Akkretionsscheiben.

Sogar für Temperaturen ab 10000 K ist der Strahlungsdruck (rot) immer noch eine Größenordnung kleiner als der Gasdruck (blau). Demnach kann der Strahlungsdruck in protoplanetaren Scheiben für Temperaturen bis 10^4 K vernachlässigt werden.
Die gleichen Untersuchungen wurden für Scheiben mit der Morphologie unserer Milchstraße gemacht. In Abbildung 3.6 sind die Ergebnisse abgebildet. Auch in diesem Radiusbereich ist die Vernachlässigung des Strahlungsdruckes gegenüber dem Gasdruck gerechtfertigt. Der Strahlungsdruck ist in diesem Beispiel mehrere Größenordnungen kleiner als der Druck des Gases.



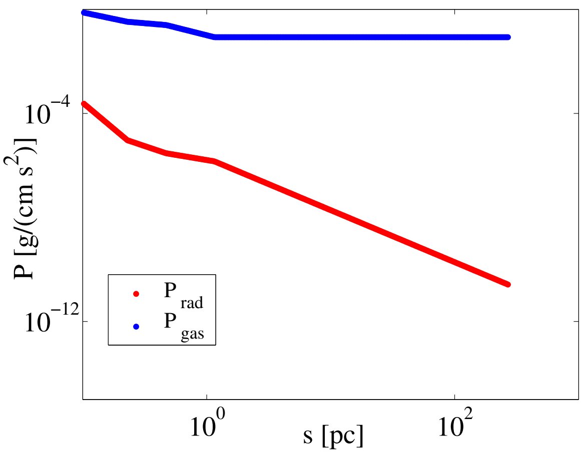


Abbildung 3.6: Temperatur (**links**) und Druck (**rechts**) als Funktion des Radius in milchstraßenähnlichen Akkretionsscheiben.

Im optisch dünnen Fall liefert der Druck der Photonen keinen Beitrag zum Gesamtdruck in der Scheibe, da die freie Weglänge der Photonen groß im Vergleich zur physikalischen Größe des Medium ist.

4 Numerische Berechnungen zeitunabhängiger Scheibenmodelle

Das System von Gleichungen, welches im letzten Abschnitt analytisch gelöst wurde, wird in diesem Kapitel auf zwei Gleichungen, die ausschließlich von der Temperatur T und der Dichte ρ abhängig sind, reduziert. Um auch optisch dünne Medien, für die es keine analytischen Opazitätsformeln gibt, mit in die Betrachtungen einzubeziehen, gehe ich zu einer numerischen Modellierung von Akkretionsscheiben über. Anschließend erfolgt der Vergleich der so gewonnenen numerischen Lösungen mit den analytischen.
Im letzten Teil dieses Kapitels werden stationäre POP-III-Akkretionsscheiben untersucht und mit Scheiben, die die heutige chemische Zusammensetzung besitzen, verglichen.

4.1 Die optische Tiefe

Das Gleichungssystem aus dem letzten Kapitel konnte analytisch gelöst werden, da es für die Opazitäten analytische Fitformeln gibt. Diese beschränkten die Anwendung jedoch auf optisch dicke Regime. Die folgende Formel beschreibt die effektive optische Tiefe, die für optisch dicke und optisch dünne Medien gilt:

$$\tau_{\mathrm{eff}} = \tau_{\mathrm{R}} + \frac{4}{3} + \frac{2}{3\tau_{\mathrm{P}}} \,. \qquad (4.1)$$

Die Rosseland- und Planck-optischen-Tiefen sind durch

$$\tau_{\mathrm{R/P}}(\rho, T) = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_{\mathrm{R/P}}(\rho, T) \qquad (4.2)$$

definiert. Die Rosseland-Opazität κ_{R} und die Planck-Opazität κ_{P} hängen nur von der Temperatur und Dichte des Mediums ab und werden in dieser Arbeit für primordiale Materie (POP-III) [Mayer04a] und für Material mit der heutigen chemischen Zusammensetzung (POP-I) [Semenov03] verwendet. Die POP-I-Opazitäten gelten für einen Temperaturbereich von 10 K bis 10000 K und für Dichten zwischen $10^{-18} - 10^{-7}\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$. Die Temperaturen der primordialen Scheiben liegen zwischen $60 - 40000\,\mathrm{K}$ und die Dichten finst man im Bereich von $10^{-16} - 10^{-2}\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$. Für diese Temperatur- und Dichtebereiche kann der Strahlungsdruck gegenüber dem Gasdruck weiterhin vernachlässigt werden.

4.2 Numerische Behandlung

Das Gleichungssystem aus Kapitel 3.1.6 wird auf zwei Gleichungen, die wie die Opazitäten nur noch von der Temperatur und dem Druck abhängen, reduziert. Dies geschieht für jedes der drei Scheibenmodelle mit den beiden unterschiedlichen Viskositäten, sodass man die nachstehenden sechs Beschreibungen erhält.

NSG (β)	NSG (DL)
$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}GM_*}{\pi s^3}=0$ $f(\rho,T)=\frac{RT}{\mu}-\left(\frac{\dot{\text{M}}}{6\pi\xi\rho\beta s^2}\right)^2=0$	$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}GM_*}{\pi s^3}=0$ $f(\rho,T)=\left(\frac{RT}{\mu}\right)^3-\left(\frac{\dot{\text{M}}GM_*}{6\pi\xi\rho\gamma s^3}\right)^2=0$
KSG (β)	**KSG (DL)**
$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}GM_*}{\pi s^3}=0$ $f(\rho,T)=\frac{RT}{\mu}-\left(\frac{\dot{\text{M}}}{3\beta\xi}\right)^2\frac{1}{\pi s\rho M_*}=0$	$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}GM_*}{\pi s^3}=0$ $f(\rho,T)=\left(\frac{RT}{\mu}\right)^3-\left(\frac{\dot{\text{M}}G}{3\gamma\xi}\right)^2\frac{M_*}{s^3\rho\pi}=0$
FSG (β)	**FSG (DL)**
$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}}{\pi s^2}\left(\frac{G\dot{\text{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{2}{3}}=0$ $f(\rho,T)=\frac{RT}{\mu}-\frac{\dot{\text{M}}}{3\pi\xi\rho\beta s^2}\left(\frac{G\dot{\text{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{1}{3}}=0$	$g(\rho,T)=\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4-\frac{\dot{\text{M}}}{24\xi\pi}\left(\frac{G\dot{\text{M}}\mu}{s\gamma RT}\right)^2=0$ $f(\rho,T)=\left(\frac{RT}{\mu}\right)^5-\frac{\dot{\text{M}}s}{3\pi\xi\rho\gamma}\left(\frac{G\dot{\text{M}}}{3s\xi\gamma}\right)^3=0$

Die Herleitungen dieser Gleichungen befinden sich im Anhang B. Für jedes einzelne Modell müssen die Nullstellen der beiden Funktionen $g(\rho,T)$ und $f(\rho,T)$ am Radius s gesucht werden. ρ und T sind genau dann Lösungen, wenn beide Funktionen unabhängig voneinander für diese Werte Nullstellen besitzen.
Die numerischen Lösungen erhält man wie folgt: Das kartesische ρ-T-Gitter ist durch die Verwendung von Opazitätstabellen vorgegeben. An den Eckpunkten jeder Gitterzelle werden die beiden Funktionen $g(\rho,T)$ und $f(\rho,T)$ ausgewertet (siehe Abbildung 4.1). Ändert sich an diesen Stellen für jede der beiden Funktionen mindestens einmal das Vorzeichen, existiert mindestens eine gemeinsame Nullstelle (Mehrfachnullstellen können ohnehin nicht aufgelöst werden). Die Position der Nullstelle wird mittels bilinearer Interpolation folgendermaßen berechnet: Liegt die gesuchte Nullstelle (ρ_0,T_0) innerhalb des

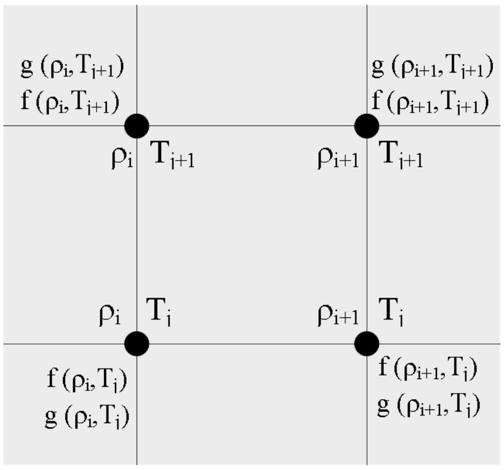


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung einer Zelle des ρ-T-Gitters.

Gitterrechtecks, gelten die beiden nachfolgenden Ungleichungen

$$\begin{aligned} \rho_i \leq \rho_0 \leq \rho_{i+1} \\ T_j \leq T_0 \leq T_{j+1} \,. \end{aligned}$$

Unter diesen Voraussetzungen können folgende Werte definiert werden:

$$\begin{aligned} y_1 &= g(\rho_i, T_j) & x_1 &= f(\rho_i, T_j) \\ y_2 &= g(\rho_{i+1}, T_j) & x_2 &= f(\rho_{i+1}, T_j) \\ y_3 &= g(\rho_{i+1}, T_{j+1}) & x_3 &= f(\rho_{i+1}, T_{j+1}) \\ y_4 &= g(\rho_i, T_{j+1}) & x_4 &= f(\rho_i, T_{j+1}) \,. \end{aligned}$$

Die bilineare Interpolation beruht auf den nachstehenden Formeln:

$$\begin{aligned} t &\equiv \frac{\rho_0 - \rho_i}{\rho_{i+1} - \rho_i} \\ u &\equiv \frac{T_0 - T_j}{T_{j+1} - T_j} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} g(\rho_0, T_0) &= (1-t)(1-u)y_1 + t(1-u)y_2 + tuy_3 + (1-t)uy_4 \overset{!}{=} 0 \\ f(\rho_0, T_0) &= (1-t)(1-u)x_1 + t(1-u)x_2 + tux_3 + (1-t)ux_4 \overset{!}{=} 0 \,. \end{aligned}$$

Die letzten beiden Gleichungen ergeben zusammen ein Gleichungssystem für die beiden unbekannten Steigungen t und u, die beide zwischen 0 und 1 liegen müssen, wenn die Nullstelle in dem betrachteten Gitterkästchen liegt.
Um die Qualität der Interpolation beurteilen zu können, wurde aus den in Tabelle 3.1

aufgeführten analytischen Opazitäten eine Opazitätstabelle generiert und mit dieser wurden die numerischen Lösungen einer protoplanetaren Akkretionsscheibe mit den Parametern $M_* = M_\odot$, $\beta = 10^{-3}$, $\mu = 1.7$ und $\dot{\mathrm{M}} = 10^{-4}\,M_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$ berechnet. Die Stützstellenabstände für Temperatur und Dichte betragen $\Delta(\log\rho) = 0.2$ und $\Delta(\log T) = 0.05$. In Abbildung 4.2 sind in den oberen Diagrammen die analytisch und numerisch berechneten Temperaturen als Funktion des Radius abgebildet. Sie stimmen sehr gut überein. Ohne bilineare Interpolation und unter Wahl des Kästchenmittelpunkts als Nullstelle erhält man die im unteren Bild der Abbildung dargestellten numerisch berechneten Temperaturen. Die Nullstellen liegen natürlich immer noch im richtigen Gitterkästchen, deswegen stimmt der prinzipielle Kurvenverlauf mit dem analytischen überein, sie sind jedoch aufgrund der fehlenden Interpolation mit einem Fehler der Größenordnung des Stützstellenabstandes behaftet. Dieser Abstand spiegelt sich im stufenartigen Verlauf dieser Lösung wider.

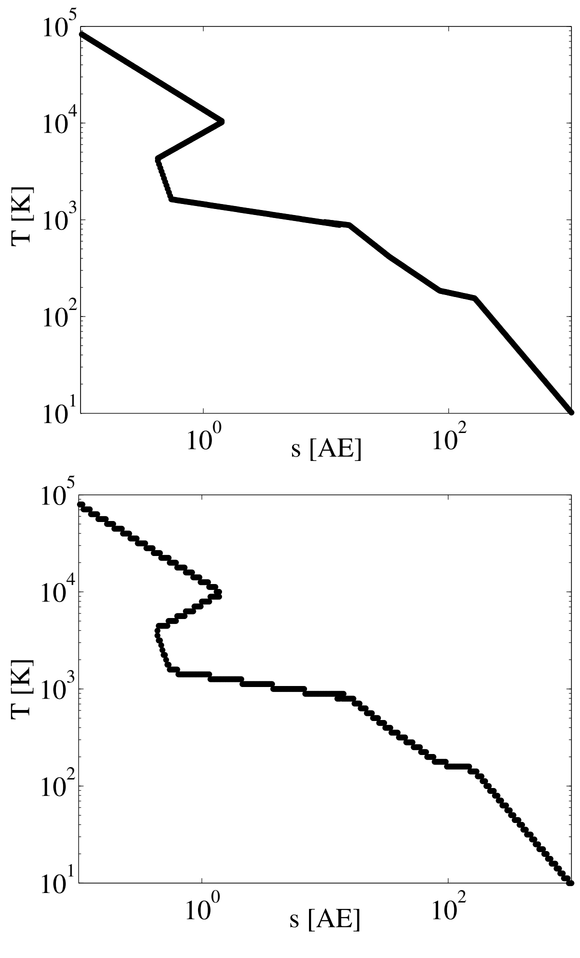


Abbildung 4.2: Temperatur als Funktion des Radius. **oben links**: analytisch berechnet. **oben rechts**: numerisch berechnet mit bilinearer Interpolation. **unten** : numerisch berechnet ohne Interpolation

Im Anschluß muss noch untersucht werden, ob die für ein bestimmtes Modell gefundenen numerischen Lösungen selbstkonsistent sind. Folgende Bedingungen müssen für jeden Scheibentyp erfüllt sein:

- Für das jeweilige Scheibenmodell muss gelten [Duschl00]:

  NSG: $M_D(s) \leq \frac{1}{2}\frac{h}{s} M_*$

  KSG: $\frac{1}{2}\frac{h}{s} M_* \leq M_D(s) \leq M_*$

  FSG: $M_* \leq M_D(s)$

- Die beiden Viskositätsbeschreibungen unterscheiden sich wie folgt:

  β-Scheiben: $\sqrt{\beta} v_\varphi < c_\mathrm{s}$

  Scheiben im stoßdissipativen Grenzfall: $\sqrt{\beta} v_\varphi \geq c_\mathrm{s}$.

Die so erhaltenen numerischen Lösungen werden nun mit den analytischen des vorherigen Kapitels verglichen. In den Abbildungen 4.3 und 4.4 sind die Flächendichte und die Temperatur in Abhängigkeit vom Radius für protoplanetare und milchstraßenartige Akkretionsscheiben dargestellt.
In der folgenden Tabelle sind der Radiusbereich und die Parameter, die für die Simulation der protoplanetaren Akkretionsscheiben verwendet wurden, angegeben.

β	μ	M_*	$\dot{\mathrm{M}}$	s_min	s_max
10^{-2}	2.0	$\mathrm{M}_\odot$	$10^{-4}\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$	0.1AE	10^4AE

Die grafischen Darstellungen der analytischen und numerischen Lösungen machen zwei Unterschiede deutlich. Zum einen sind die Kurvenverläufe am Rand der protoplanetaren Scheibe etwas unterschiedlich, da an dieser Stelle der Übergang vom optisch dünnen zum optisch dicken Medium erfolgt. Dieser wird in den beiden Fällen unterschiedlich behandelt. Zum anderen erkennt man in der Darstellung der numerisch berechneten

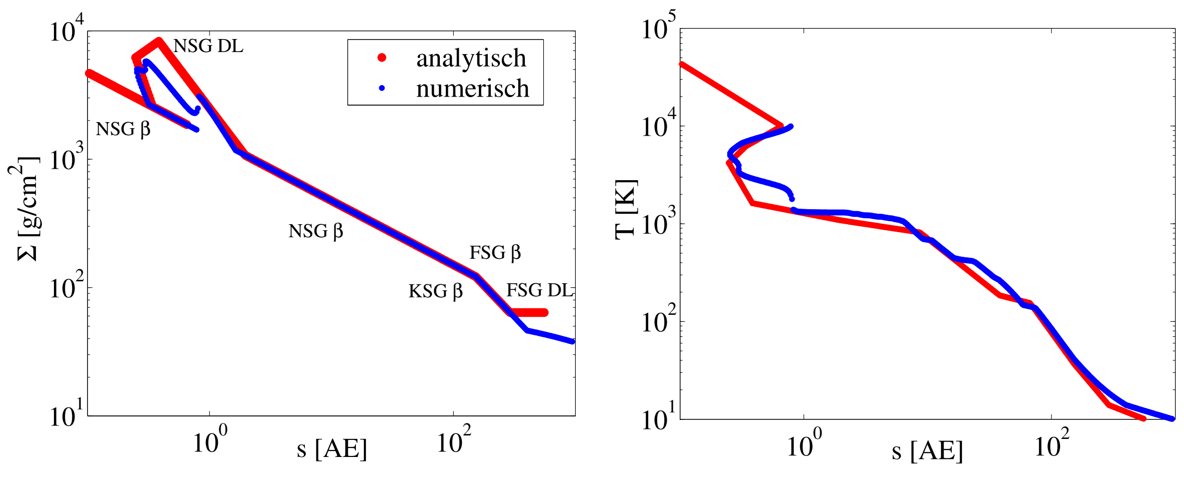


Abbildung 4.3: Vergleich der numerischen mit den analytischen Lösungen für protoplanetare Akkretionsscheiben. **Links**: Flächendichte und **rechts**: Temperatur als Funktion des Radius.

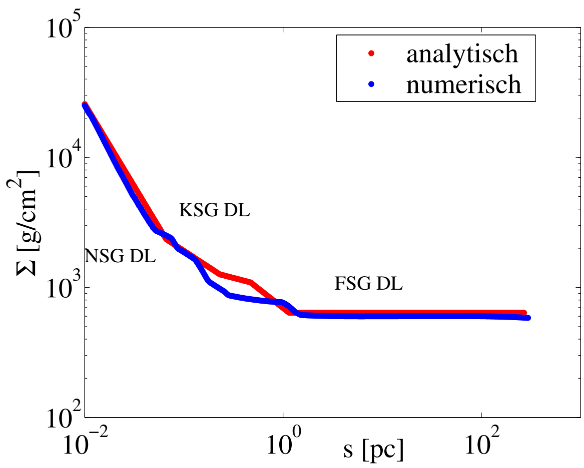
Temperaturen detailiertere Strukturen, die von der Verwendung der Opazitätstabellen herrühren. Besonders in den Bereichen zwischen 8 - 40 AE (in dem die Absorption durch Staubteilchen dominiert wird) und zwischen 0.2 - 0.5 AE (wo Moleküle die Strahlung absorbieren) gibt es Absorbtionskanten, die durch einzelne Teilchensorten des Staub- bzw. Molekülgemisches verursacht werden. In den analytischen Fitformeln wird über die Beiträge zur Opazität der einzelnen Teilchenarten eines Gemisches gemittelt. Somit zeigen die berechneten Temperaturverläufe unter Verwendung dieser Formeln weniger Details.

Sehr auffällig sind die Mehrfachlösungen im Bereich von 0.2-0.8 AE. Hier gibt es am Radius s mehrere $T-\rho-$Wertepaare, für die die Gleichungen vom Anfang dieses Abschnittes eine Nullstelle besitzen. Im Falle der Lösung mit der niedrigsten Temperatur tragen Staubteilchen und Moleküle zur Absorption bei. Die Lösung mit der nächst höheren Temperaur ist charakterisiert durch H^--Absorption und dann folgt für noch höhere Temperaturen die gebunden-frei- und frei-frei-Absorption der Atome. Ob alle Lösungen thermisch , viskos oder gravitativ stabil sind, wird in dieser Arbeit nicht untersucht. Näheres dazu findet sich in [Mayer04b].

Weiterhin sei erwähnt, dass es für Temperaturen, die größer als 10000 K sind, keine numerischen Lösungen gibt, da die in dieser Simulation verwendeten POP-I-Opazitäten aus [Semenov03] nur bis zu dieser Temperatur zur Verfügung stehen.

Für Akkretionsscheiben mit der Morphologie unserer Michstraße wurden diese Parameter zur Berechnung der Scheibengrößen verwendet.

β	μ	M_*	$\dot{M}$	s_{min}	s_{max}
10^{-2}	2.0	$10^6 M_\odot$	$10^{-1} M_\odot\,yr^{-1}$	10^{-2}pc	10^4pc



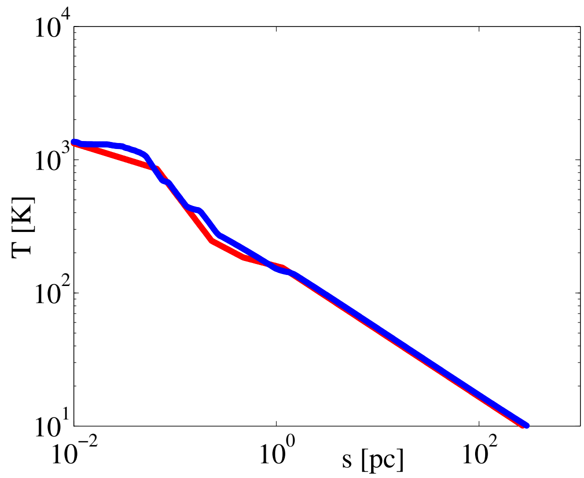


Abbildung 4.4: Vergleich der numerischen mit den analytischen Lösungen für milchstraßenähnliche Akkretionsscheiben. **Links**: Flächendichte und **rechts**: Temperatur als Funktion des Radius.

Wieder erfolgt am Scheibenrand der Übergang vom optisch dünnen zum optisch dicken Medium und man erhält dort leicht unterschiedliche Lösungen. Der numerisch berechnete Temperaturverlauf besitzt auch hier Strukturen, die dem anaytischen fehlen.
Im nächsten Abschnitt, wenn Akkretionsscheiben mit einer primordialen chemischen Zusammensetzung in die Untersuchungen mit einbezogen werden, folgt eine Diskussion der Lösungen.

4.3 Stationäre POP-III-Scheiben

Bevor im nächsten Kapitel die primordiale Chemie in Akkretionsscheiben untersucht wird, müssen Lösungen für die POP-III-Scheiben gefunden werden. Diese numerischen Lösungen werden für die beiden Fälle protoplanetarer und milchstraßenähnlicher Akkretionsscheiben, die bereits in den vorherigen Abschnitten betrachtet wurden, mit Lösungen von POP-I-Scheiben verglichen.
Das Ausgangsrechteck für die gegebene POP-III-Opazitätstabelle wird durch 2D-Spline-Interpolation so verfeinert, dass man für ρ und T folgenden Stützstellenabstand erhält: $\Delta(\log\rho) = 0.05$ und $\Delta(\log T) = 0.01$.

Protoplanetare Akkretionsscheiben

Die Parameter dieser Scheibenart sind in der folgenden Tabelle aufgeführt.

β	μ	M_*	$\dot{\mathrm{M}}$	s_{min}	s_{max}
10^{-3}	2.0	$\mathrm{M}_\odot$	$10^{-2}/10^{-4}/10^{-6}\ \mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$	10^{-3}AE	10^{7}AE

In den Simulationen wurde zusätzlich die Massenflussrate variiert. Die Abbildung 4.5 zeigt die berechnete Flächendichte, die Temperatur und das Verhältnis der Höhe zum Radius von primordialen protoplanetaren Akkretionsscheiben und von Scheiben mit der heutigen chemischen Zusammensetzung.
Alle Akkretionsscheiben, deren Lösungen aus den drei verwendeten Scheibenmodellen zusammengesetzt werden, sind im inneren Radiusbereich nicht-selbstgravitierend, werden aber mit zunehmendem Radius selbstgravitierend. Im Übergangsbereich liegt Kepler Selbstgravitation vor. Im Innenbereich der Scheibe ist die Zentralmasse so nah, dass Selbstgravitation, verursacht durch die Scheibenmasse, praktisch keine Rolle spielt. Dies ändert sich mit zunehmendem Abstand von dieser Zentralmasse. Die Anziehungskraft der eigenen Scheibenmasse dominiert über die Gravitationskraft des Zentralobjektes im Scheibenmittelpunkt.
Beim Vergleich der Temperaturdiagramme der primordialen mit den staubhaltigen Scheiben fällt auf, dass für hohe Temperaturen ($\log T \geq 3.8$) die Kurvenverläufe gleich sind. Bei so hohen Temperaturen sind Wasserstoff- und Heliumspezies für die Absorption im Gas verantwortlich und die Opazitäten sind somit für beide chemischen Zusammensetzungen gleich. Da die verwendeten POP-I-Opazitäten nur für den Temperaturbereich

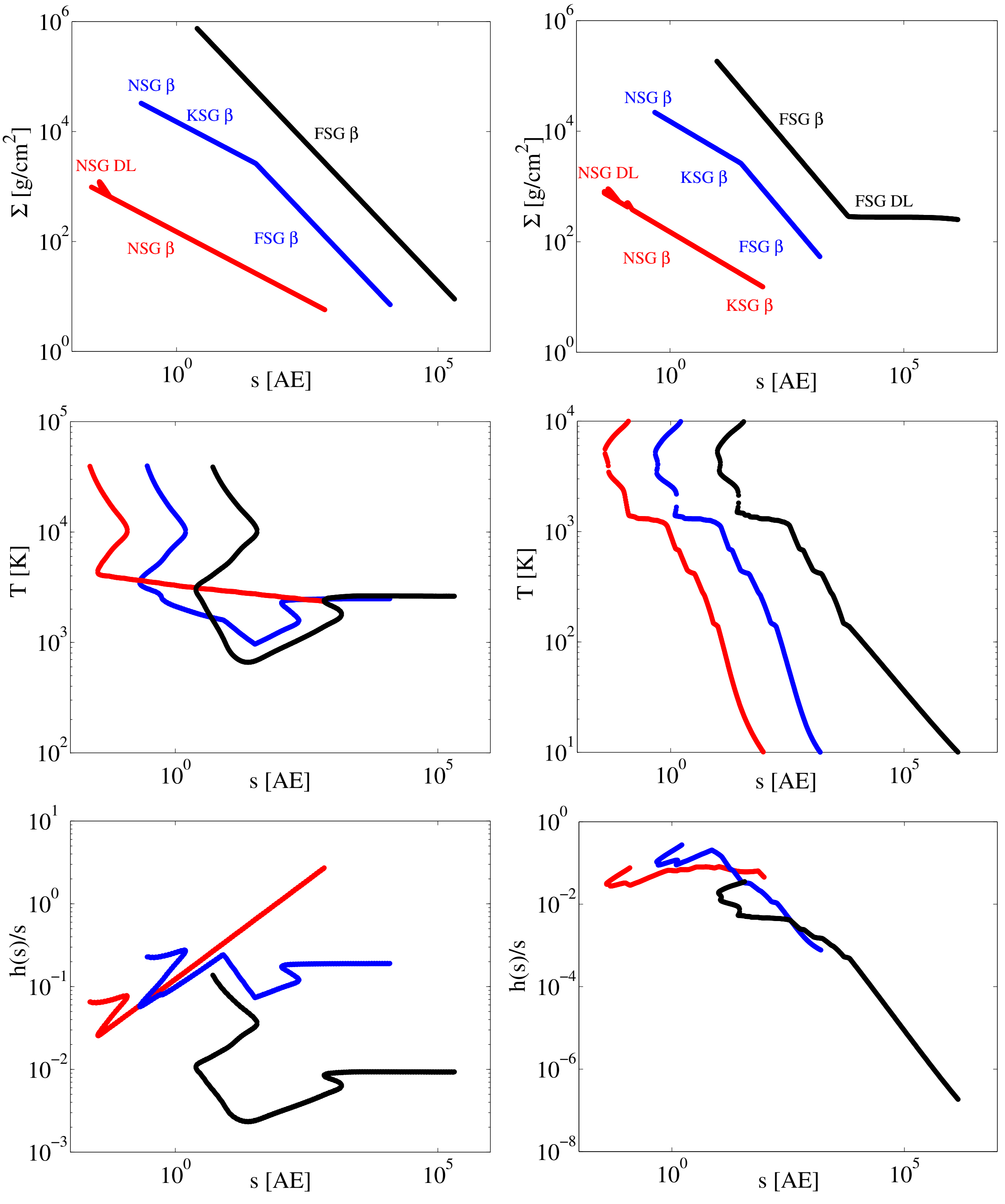


Abbildung 4.5: Darstellung der berechneten Größen der protoplanetaren Akkretionscheiben mit primordialer (**links**) und heutiger (**rechts**) chemischer Zusammensetzung. Von oben nach unten: Flächendichte, Temperatur und das Verhältnis von Höhe zum Radius. Die Massenflussraten betragen 10^{-2} (schwarz), 10^{-4} (blau) und 10^{-6} (rot) $M_\odot\,yr^{-1}$.

zwischen 10-10^4 K gelten, gibt es für Scheiben mit diesen Opazitäten keine Lösungen mit höheren Temperaturen. Ist man an diesen interessiert, muss man ab 10000 K Opazitätstabellen, die für höhere Temperaturen berechnet wurden, verwenden. Man erkennt ebenfalls, dass die niedrigst mögliche Temperatur von 10 K bestimmt, wo die POP-I-Scheiben enden. Im Falle der primordialen Scheiben wird der Rand nicht durch die kleinste Temperatur bestimmt sondern durch die kleinstmögliche Dichte von 10^{-16} g cm^{-3}. Auf die grafische Darstellung wird an dieser Stelle verzichtet.
Besonders auffällig ist, dass die POP-III-Scheiben in ihren äußeren Bereichen isotherm sind. Die Temperaturen liegen in diesem Gebiet unabhängig von der Massenflussrate bei 3000 K. Dieses Verhalten wurde bereits in [Mayer04b] untersucht. Im Unterschied zu dieser Veröffentlichung sind in dieser Arbeit die radialen Verläufe von h(s)/s für die konstanten Temperaturen im Scheibenaußenbereich ebenfalls konstant. In [Mayer04b] steigen die Kurven für $\frac{h}{s}$ so weit an, bis die Bedingung für dünne Scheiben $h \ll s$ nicht mehr erfüllt werden kann. Dies wird nun für die hier verwendeten Scheibenmodelle im Falle des stoßdissipativen Limes untersucht:

$$\text{NSG:} \quad \frac{h}{s} = \frac{c_\text{s}}{\omega s} \propto \frac{T^{\frac{1}{2}}}{s^{-\frac{3}{2}} s} = (Ts)^{\frac{1}{2}} \quad \text{mit} \quad \omega \propto s^{-\frac{3}{2}}$$

$$\text{KSG:} \quad \frac{h}{s} \propto \frac{c_\text{s}^2}{M_D \omega^2 s^2} \propto \frac{c_\text{s}^2}{\Sigma \omega^2 s^4} \propto \frac{c_\text{s}^4}{\omega^3 s^4} \propto T^2 s^{\frac{1}{2}} \; .$$

In diesen beiden Fällen steigt das Verhältniss $\frac{h}{s}$ für konstante Temperaturen mit größer werdenden Radius wie $s^{\frac{1}{2}}$ an. Die Autoren von [Mayer04b] haben in ihrer Arbeit diese beiden Fälle für ihre Scheibenmodelle verwendet.
Sind die Scheiben im äußeren Bereich selbstgravitierend, gilt:

$$\text{FSG:} \quad \frac{h}{s} \propto \frac{c_\text{s}^2}{\omega^2 s^2} \propto \frac{T}{\omega^2 s^2} \propto T^3 \quad \text{mit der Gleichung (B.32)} \quad \omega \propto (Ts)^{-1}$$

Für konstante Temperaturen bleibt also auch $\frac{h}{s}$ konstant, wenn die Scheiben selbstgravitierend sind. Die Bedingung $h \ll s$ wird somit auch für größere Radien erfüllt. Deswegen besitzen die in dieser Arbeit berechneten Scheiben eine größere radiale Ausdehnung als die Scheiben in [Mayer04b].

Milchstraße

Für Akkretionsscheiben, die der Milchstraße ähneln, wurden diese Parameter in den Simulationen verwendet.

β	μ	M_*	$\dot{M}$	s_{min}	s_{max}
10^{-3}	2.0	$10^6\,M_\odot$	$10^{-2}/10^{-1}/10^0\,M_\odot\,\text{yr}^{-1}$	10^{-4}pc	10^5pc

In Abbildung 4.6 sind die Ergebnisse für diese Scheibenart abgebildet. Für eine solche Akkretionsscheibe sind die radiale und damit auch vertikale Ausdehnung um Größenordnungen größer als bei einer protoplanetaren Scheibe. Der Temperaturverlauf und das

Verhältnis $\frac{h}{s}$ besitzen dieselben Eigenschaften, die bereits beim vorherigen Scheibenbeispiel diskutiert wurden.
Es fällt jedoch auf, dass sich die radialen Verläufe der Flächendichte für protoplanetare Scheiben und milchstraßenartige Scheiben deutlich voneinander unterscheiden. Vergleicht man diese mit den Flächendichten, die in [Mayer04b] berechnet werden, findet man deutliche Überstimmungen mit dem Flächendichteverlauf im Falle der Milchstraße. Die radialen Kurvenverläufe der Flächendichte der protoplanetaren Akkretionsscheibe gleichen denen aus der o.g. Veröffentlichung nur wenig. Dies hängt mit der Verwendung verschiedener Viskositätsbeschreibungen zusammen. Die Viskosität, die die Autoren in [Mayer04b] gebrauchen, wird durch diese Formel gegeben:

$$\nu = \alpha \frac{P}{\rho\omega} \, .$$

Diese Viskositätsbeschreibung entspricht der Viskosität im stoßdissipativen Grenzfall, wie sie in dieser Arbeit zur Anwendung kommt. Für milchstraßenähnliche Akkretionsscheiben wurden Lösungen über weite Bereiche der Scheibe mit genau dieser Viskositätsbeschreibung erhalten. Im Falle der protoplanetaren Scheibe findet man vor allem Lösungen, die mittels β-Viskosität berechnet wurden. Somit ist die alleinige Verwendung einer Viskosität für Scheiben im stoßdissipativen Limes nicht ausreichend, da die Turbulenzgeschwindigkeit kleiner als die Schallgeschwindigkeit werden kann. Dieser Fall benötigt jedoch eine Beschreibung durch die β-Viskosität.

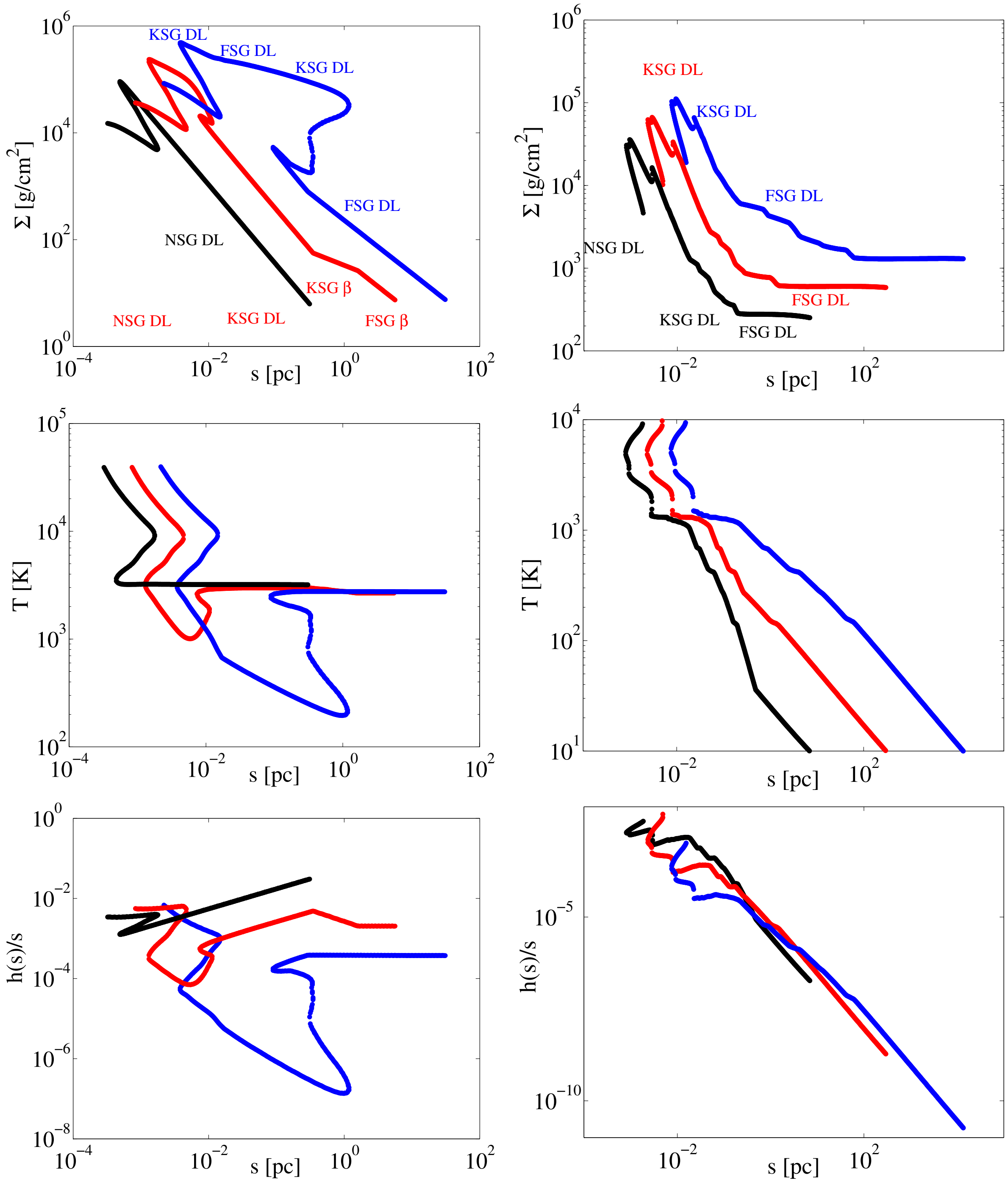


Abbildung 4.6: Darstellung der berechneten Größen der milchstraßenähnlichen Akkretionscheiben mit primordialer (**links**) und heutiger (**rechts**) chemischer Zusammensetzung. Von oben nach unten: Flächendichte, Temperatur und das Verhältnis von Höhe zum Radius. Die Massenflussraten betragen 10^{-2} (schwarz), 10^{-1} (rot) und 10^{0} (blau) $M_\odot\,yr^{-1}$.

5 Chemische und viskose Zeitskalen im Vergleich

In einem der vorherigen Abschnitte wurde bereits festgestellt, dass, wenn das mittlere Molekulargewicht μ als Parameter definiert ist, die Scheibenlösungen für unterschiedliche μ prinzipiell den gleichen Verlauf besitzen, jedoch können die Werte der Lösungen um mehrere Größenordnungen verschieden sein. In diesem Kapitel wird das mittlere Molekulargewicht aus der chemischen Zusammensetzung der Materie bestimmt.
Im Folgenden wird untersucht, ob sich im Gas der Akkretionsscheibe das chemische Gleichgewicht eingestellt hat, denn dies ist die Annahme, die der Berechnung der in dieser Arbeit verwendeten POP-III-Opazitäten zu Grunde liegt. Dafür muss die chemische Zeitskala τ_{chem} - dies ist die Zeit, die ein Gasgemisch benötigt, bis sich in ihm das chemische Gleichgewicht eingestellt hat - mit der viskosen Zeitskala τ_{vis} verglichen werden. τ_{vis} ist die Zeitdauer eines Materietransportes vom Scheibenradius s bis zur Zentralmasse. Diese Zeitskala lässt sich wie folgt berechnen:

$$\tau_{\text{vis}} = \frac{s^2}{\nu}\,. \tag{5.1}$$

Ist die chemische Zeitskala viel kleiner als die viskose ($\tau_{\text{vis}} \gg \tau_{\text{chem}}$), dann ist die Annahme einer sich im Gleichgewicht befindenden Chemie gerechtfertigt. Um dies zu prüfen, wurde die chemische Entwicklung eines Volumenpaketes, das sich in der Akkretionsscheibe bewegt, untersucht. Da der Materietransport innerhalb der Akkretionsscheibe in Richtung Zentralmasse erfolgt, wird die chemische Entwicklung des Materievolumens, das, vom Rand beginnend, zum Scheibenzentrum transportiert wird, verfolgt. Die chemische Zusammensetzung ändert sich somit entsprechend dem Temperatur- und Dichteverlauf.
Die radiale Bewegung des Materiepaketes kann folgendermaßen bestimmt werden: die Driftgeschwindigkeit in Richtung Zentralmasse kann aus der Gleichung (3.6) an jedem Radius s berechnet werden. Der unmittelbar neben dem alten Radius s_{alt} innen liegende Punkt s_{neu} wird durch die räumlich Diskretisierungsvorschrift

$$\log s_{\text{neu}} = \log s_{\text{alt}} - 0.01 \tag{5.2}$$

bestimmt. Somit ist die Wegstrecke, die das Materiepaket zwischen zwei Stützstellen zurücklegt (siehe Abbildung 5.1), gleich

$$ds = s_{\mathrm{alt}} - s_{\mathrm{neu}} \,. \tag{5.3}$$

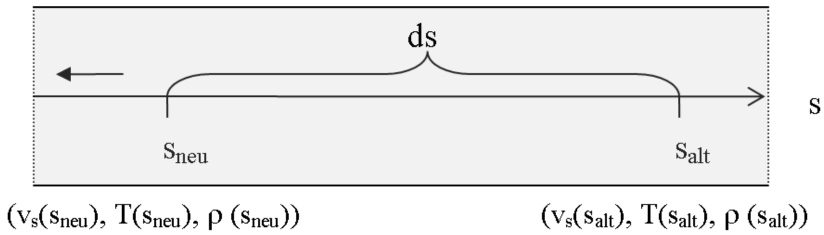


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Stützstellen.

Mit dieser Weglänge und der radialen Driftgeschwindigkeit ist die Zeit, die vergeht, bis das Volumenpaket von s_{alt} zu s_{neu} transportiert wird, gegeben durch

$$dt \approx \frac{ds}{v_s(s_{\mathrm{neu}})} \,. \tag{5.4}$$

Diese Zeit hat das chemische Gasgemisch, um auf die Änderungen der Temperatur ($T(s_{\mathrm{alt}}) \rightarrow T(s_{\mathrm{neu}})$) und der Dichte ($\rho(s_{\mathrm{alt}}) \rightarrow \rho(s_{\mathrm{neu}})$) zu reagieren. Die chemische Zeitskala erhält man, indem man diesem System in einer parallelen Rechnung so viel Zeit (maximal eine Hubbelzeit) gibt, dass es das chemische Gleichgewicht erreichen kann. Die drei Zeitskalen dt, τ_{vis} und τ_{chem} können im Anschluß miteinander verglichen werden. Dies geschieht im Folgenden für repräsentative Punkte in der Akkretionsscheibe.
Da die Kurververläufe der Lösungen (isothermer Außenbereich, Dreifachlösungen etc.) für protoplanetare und milchstraßenartige Scheiben prinzipiell gleich sind, ist es ausreichend, nur eine dieser Scheibenarten für die Untersuchungen zu berücksichtigen. Die gewählte protoplanetare Akkretionsscheibe besitzt folgende Eigenschaften.

β	M_*	$\dot{\mathrm{M}}$	s_{min}	s_{max}
10^{-3}	$\mathrm{M}_\odot$	$10^{-2}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{yr}^{-1}$	1 AE	10^6 AE

Es ist nicht möglich die chemische Entwicklung innerhalb der Scheibe durchgängig zu verfolgen, weil es wie in den bisher berechneten POP-III-Scheiben in manchen Radiusbereichen Mehrfachlösungen für einen Abstand s von der Zentralmasse gibt. Da jedoch nur die Zeitskalen und nicht Transportphänomene untersucht werden sollen, wird die Akkretionsscheibe, in der die chemische Entwicklung untersucht wird, in diese drei Bereiche (siehe Abbildung 5.2) unterteilt:

- 1. Bereich: Isothermer Außenbereich $1000\,\mathrm{AE} \leq s \leq 200000\,\mathrm{AE}$
- 2. Bereich: Bereich mit den höchsten Temperaturen $4\,\mathrm{AE} \leq s \leq 31\,\mathrm{AE}$
- 3. Bereich: Bereich mit den niedrigsten Temperaturen $4\,\mathrm{AE} \leq s \leq 450\,\mathrm{AE}$

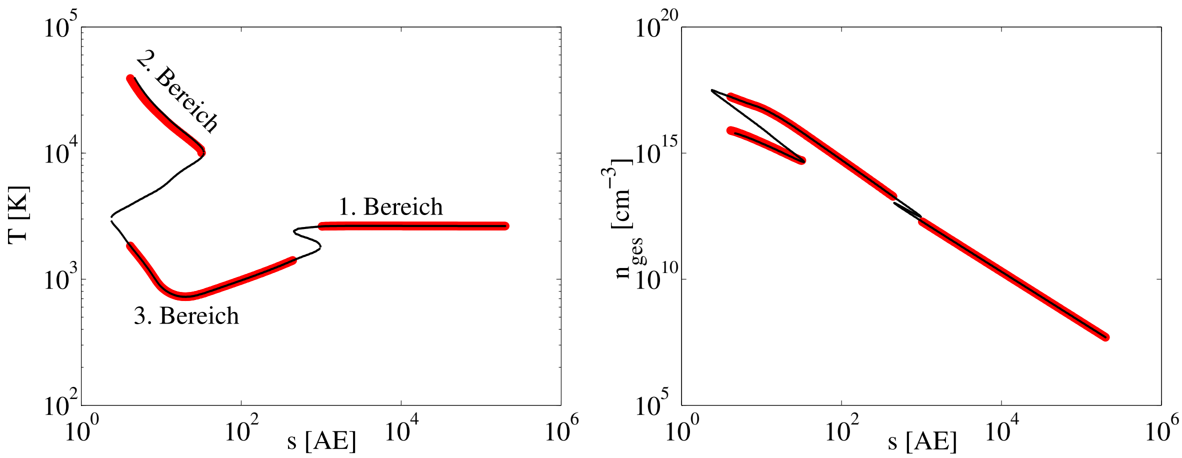


Abbildung 5.2: Die Bereiche der Akkretionsscheibe in denen die chemischen und viskosen Zeitskalen untersucht werden.

Die Berechnung der chemischen Entwicklung erfolgt für jeden dieser Bereiche auf folgende Weise: Für $\mu = 2.0$ werden die Temperatur und die Dichte des äußeren Randes des Bereiches bestimmt. Das primordiale Gasgemisch mit den Massenanteilen X=0.758 der Wasserstoffspezies und Y=0.242 der Heliumspezies entwickelt sich so lange, bis es das chemische Gleichgewicht erreicht hat. Mit dieser Gleichgewichtszusammensetzung kann das mittlere Molekulargewicht mit Hilfe der folgenden Beziehung berechnet werden

$$\mu = \frac{\sum\limits_i n_i A_i}{\sum\limits_i n_i} . \tag{5.5}$$

Hierbei ist n_i die Teilchenzahldichte der Spezies i und $A_i = m_i/m_p$ das Verhältnis der Masse dieser Teilchensorte m_i zur Protonenmasse m_p. Für die obigen drei Bereiche sind die so berechneten mittleren Molekulargewichte kleiner als zwei. Aus dem Kapitel 3.2 ist bekannt, dass die Scheibenlösungen für kleiner werdende μ zu etwas kleineren Radien hin verschoben werden. Da sich das Materiepaket genau in diese Richtung bewegt, ist die μ-Shift der Kurven nicht weiter bedeutsam. Der umgekehrte Fall wäre jedoch problematisch, da in Bereichen mit kleinen Temperaturen das Gas im molekularem Zustand vorliegt und μ größer als zwei ist. Lösungen für derartige mittlere Molekulargewichte beginnen aber bei etwas weiter entfernten Radien als Lösungen für $\mu = 2.0$. Man befindet sich also bereits im Bereich, in dem man die Chemie untersuchen möchte, und nicht am

Rand.
Die Gasamtteilchenzahldichte berechnet sich aus der Dichte, dem μ und der Protonenmasse

$$n_{\mathrm{ges}} = \frac{\rho}{\mu m_p} \,. \tag{5.6}$$

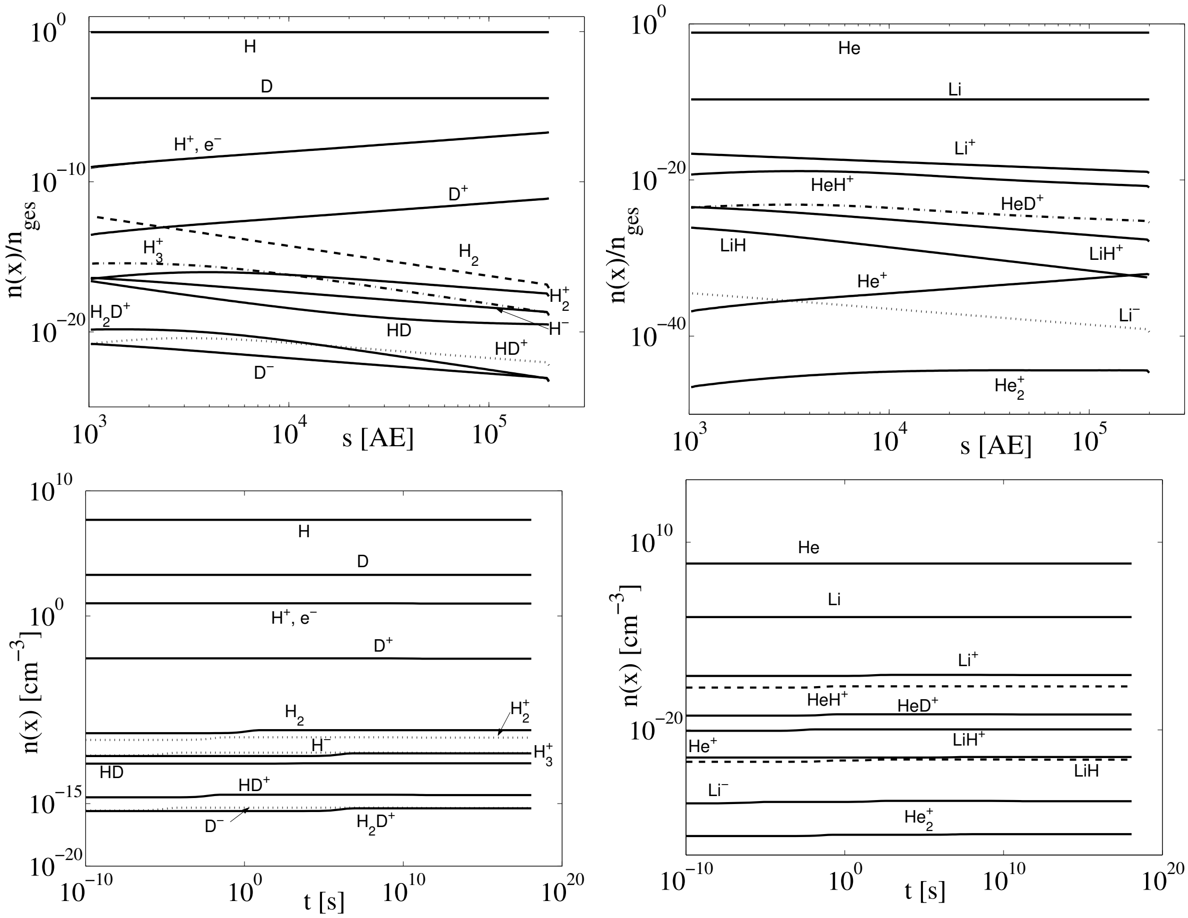
In diesen Simulationen wurde der Einfachheit halber angenommen, dass die Strahlungstemperatur gleich der Gastemperatur ist. Diese beiden Temperaturen gehen in die Berechnung der Reaktionsratenkoeffizienten mit ein.

1. Bereich: Die äußere isotherme Scheibe

Aufgrund der konstant bleibenden Temperatur wird die Entwicklung der Teilchenzahldichten der Spezies durch die Änderung der Gesamtteilchenzahldichte bedingt. Die chemische Entwicklung aller Teilchenarten ist in Abbilung 5.3 in den beiden oberen Diagrammen (links: H- und D-Spezies und rechts: He- und Li-Spezies) dargestellt. Die Gesamtteilchenzahldichte nimmt für kleiner werdende Radien gleichmäßig zu. Dementsprechend ändern sich auch die Teilchenzahldichten. Durch das Ansteigen der Gesamtdichte wird besonders die H_2-Bildung gefördert.
Im unteren Diagramm dieser Abbildung sind die Zeit dt, die für den Transport des Materiepaketes zwischen zwei räumlichen Stützstellen benötigt wird, und die viskose Zeitskala dargestellt. Hier ist der Radius $s_0 = 200000\,\mathrm{AE}$ makiert, da bei diesem Abstand vom Zentralobjekt die chemische Zeitskala bestimmt wird. Die chemische Entwicklung der Spezies bis ins chemische Gleichgewicht zwischen zwei Stützstellen um s_0 ist in den beiden mittleren Diagrammen abgebildet. Aus ihnen kann man ablesen, dass bei $t = 10^7\,\mathrm{s}$ der letzte Stoff, dies ist H_3^+, seinen Gleichgewichtszustand erreicht. Die viskose Zeitskala beträgt ungefähr $\tau_{\mathrm{vis}}(s_0) = 10^{15}\,\mathrm{s}$ und ist damit deutlich größer als die chemische. Dieses Verhalten findet man in dem gesamten äußeren isothermen Scheibenrand. In den folgende Bereichen, die untersucht werden, ändert sich neben der Dichte auch die Temperatur und damit sind deutliche Veränderungen der chemischen Zusammensetzung zu erwarten.

2 . Bereich: Hoch-Temperatur-Bereich

Die Ergebnisse der Untersuchung zur Chemie in der Akkretionsscheibe zwischen 4 AE und 31 AE sind in Abbildung 5.4 grafisch dargestellt. Wie in der Abbildung davor sind oben die chemische Entwicklung aller Stoffe als Funktion des Radius, unten die viskose Zeitskala und das dt und in der Mitte die zeitliche Teilchenzahldichtenänderungen beim Radius $s_0 = 31\,\mathrm{AE}$ abgebildet. Die Dichteverläufe der Teilchensorten entwickeln sich im Gegensatz zu den Dichten im isothermen Scheibenrand viel stärker. Jedoch ist die chemische Zeitskala aufgrund der hohen Temperaturen und der großen Dichten relativ klein. Sie liegt beim Radius s_0 bei $10^{-2}\,\mathrm{s}$ und ist um viele Größenordnungen kleiner als die viskose Zeitskala, die $10^{11}\,\mathrm{s}$ beträgt. Damit ist ebenfalls in diesem Scheibenbereich die Annahme $\tau_{\mathrm{vis}} \gg \tau_{\mathrm{chem}}$ gerechtfertigt.



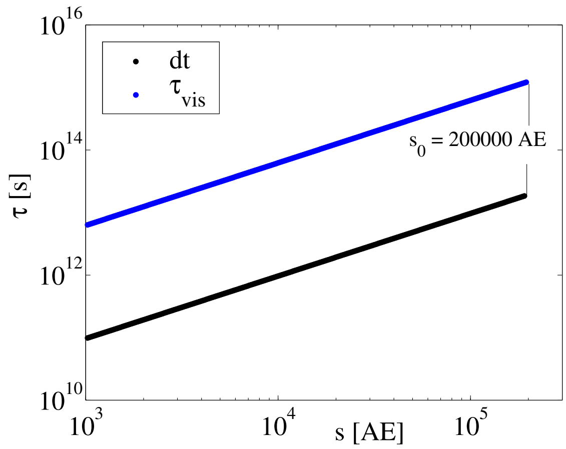
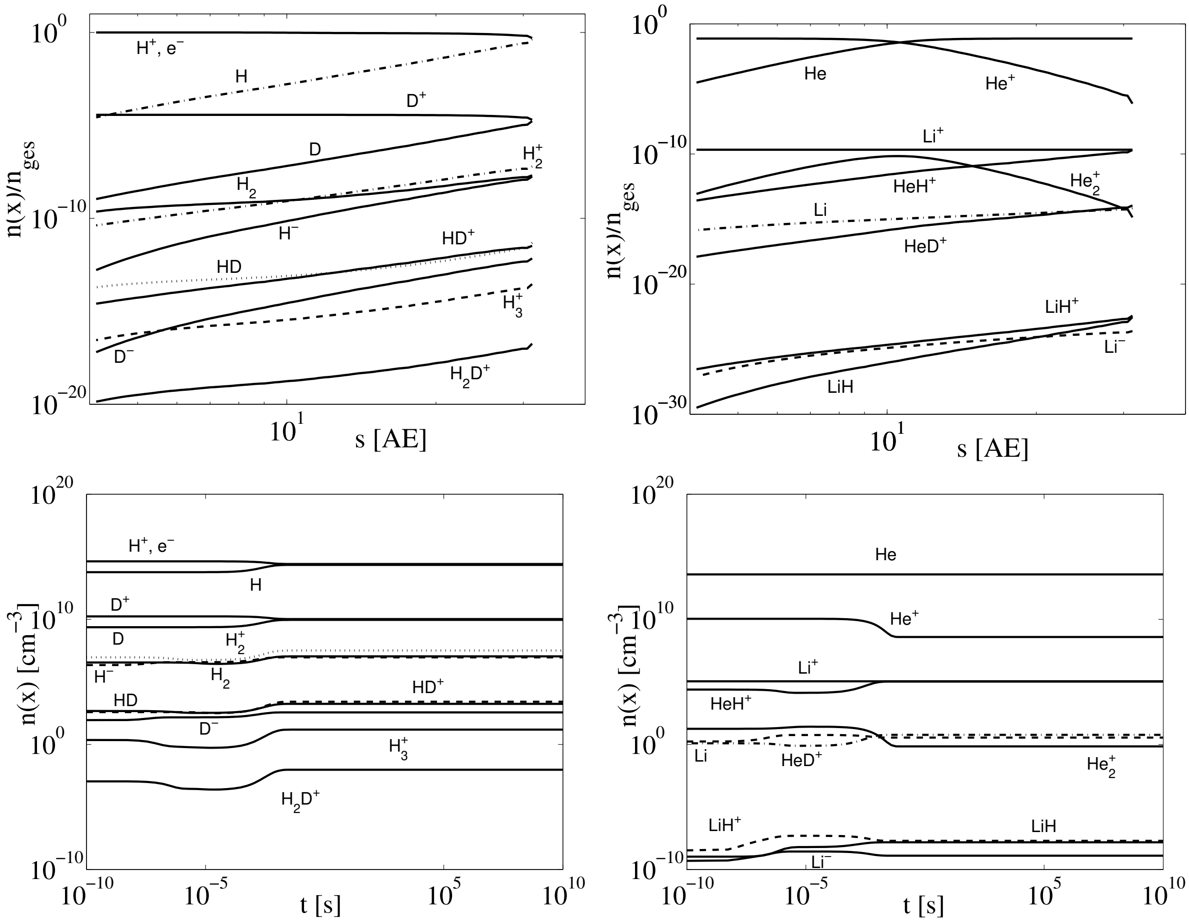


Abbildung 5.3: Transport eines Materievolumens durch den isothermen äußeren Scheibenbereich. **oben**: die chemische Entwicklung aller Spezies als Funktion des Radius. **Mitte**: zeitlicher Verlauf der Teilchenzahldichten am Radius $s_0 = 200000\,\mathrm{AE}$. **unten**: die viskose Zeitskala und die Transportzeit zwischen zwei benachbarten räumlichen Stützstellen dt.

3. Bereich: Bereich der niedrigsten Temperaturen

In diesem Bereich variiert die Scheibentemperatur zwischen 700-2000 K. Für diese niedrigen Temperaturen sind die chemischen Zeitskalen um Größenordnungen größer als sie im Hoch-Temperatur-Bereich waren. Aus Abbildung 5.5 kann τ_{chem} am Radius s_0 abgelesen



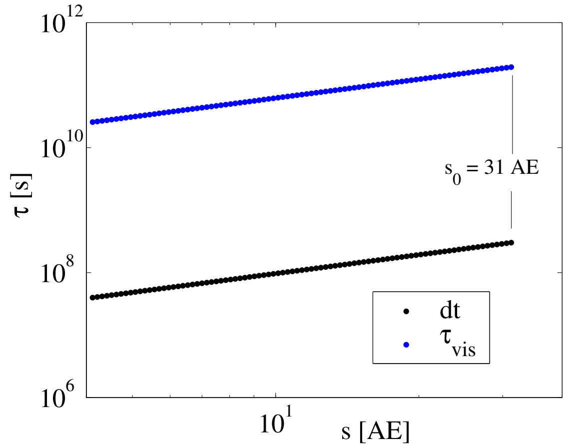
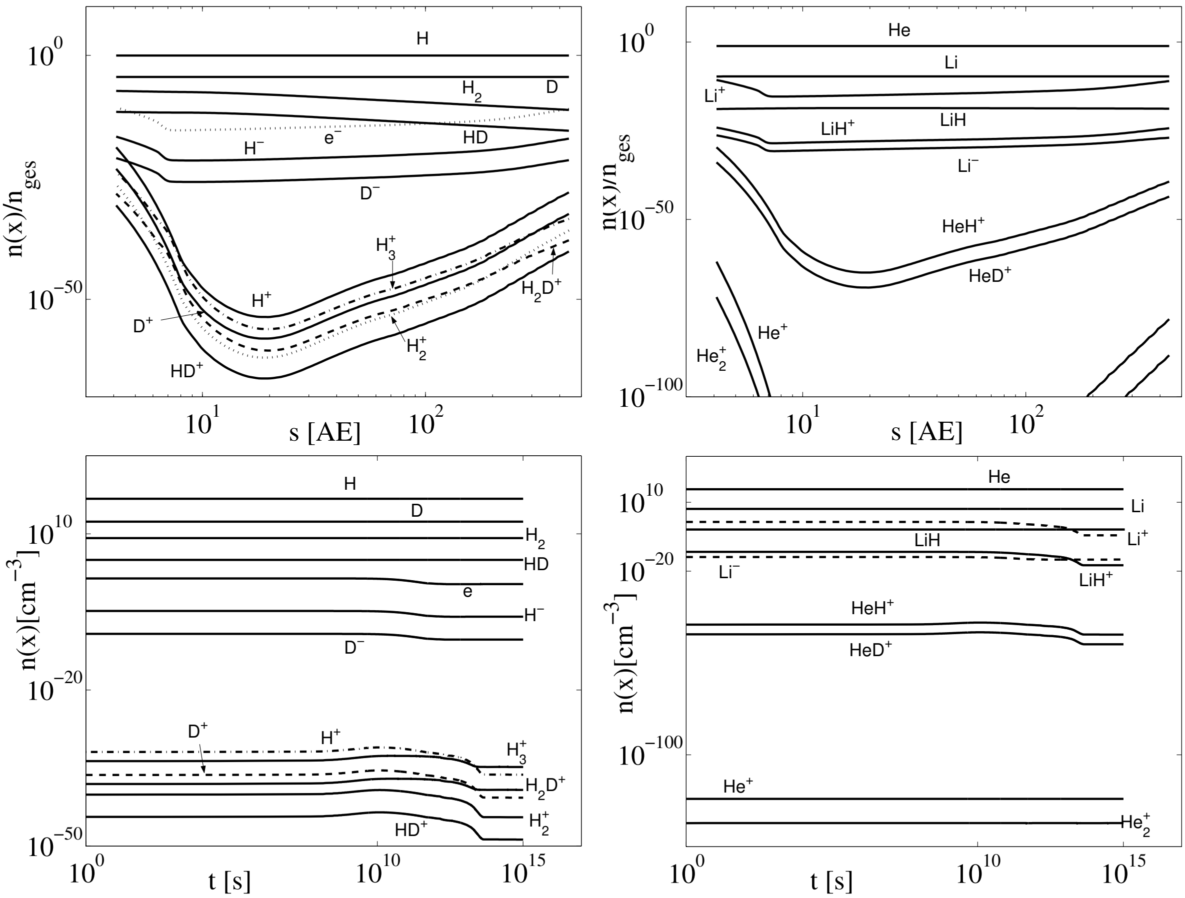


Abbildung 5.4: Transport eines Materievolumens durch den Bereich der Akkretionsscheibe, der die höchsten Temperaturen besitzt. **oben**: die chemische Entwicklung aller Spezies als Funktion des Radius. **Mitte**: zeitlicher Verlauf der Teilchenzahldichten am Radius $s_0 = 31\,\mathrm{AE}$. **unten**: die viskose Zeitskala und die Transportzeit zwischen zwei benachbarten räumlichen Stützstellen dt.

werden. Sie beträgt $4 \cdot 10^{13}$ s und ist damit nahezu drei Größenordnungen größer als die viskose Zeitskala mit $\tau_{\mathrm{vis}} = 6 \cdot 10^{10}$ s. Da sich jedoch die Teilchenzahldichten einiger Stoffe (wie z.B. H, D, H_2, HD etc.) aufgrund der geringen Temperatur- und Dichteveränderung von vornherein nicht ändern, muss genauer untersucht werden, welche Teilchenarten Ein-



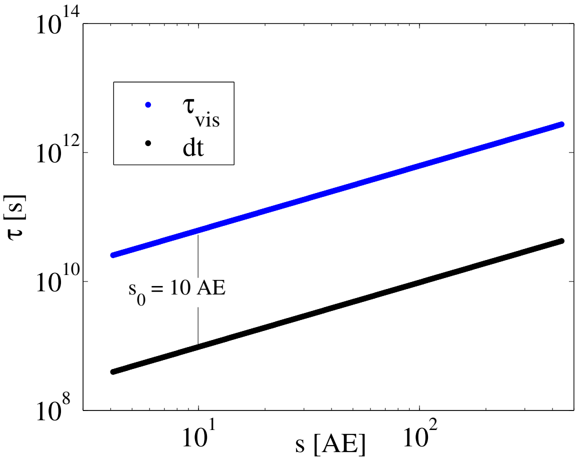


Abbildung 5.5: Transport eines Materievolumens durch den Bereich der Akkretionsscheibe mit den niedrigsten Temperaturen. **oben**: die chemische Entwicklung aller Spezies als Funktion des Radius. **Mitte**: zeitlicher Verlauf der Teilchenzahldichten am Radius $s_0 = 10\,\mathrm{AE}$. **unten**: die viskose Zeitskala und die Transportzeit zwischen zwei benachbarten räumlichen Stützstellen dt.

fluss auf die Opazität haben und ob sich diese im chemischen Gleichgewicht befinden. Dafür ist es wichtig zu wissen, ob das Medium optisch dick oder dünn ist, da in diesen beiden Fällen die Absorption durch verschiedene Prozesse erfolgt. In Abbildung 5.6 sind rechts die Rosseland- und Planck-optischen-Tiefen dargestellt. Im Bereich des Radius $s_0 = 10\,\mathrm{AE}$ findet gerade der Übergang vom optisch dicken zum optisch dünnen Medium statt. Aus diesem Grund werden alle für diesen Temperatur- und Dichtebereich wichtigen Absorptions- und Streuprozesse untersucht. Für Temperaturen von 700 K bis 2000 K und Dichten mit $-11 < \log \rho < -6$ (siehe Abbildung 5.6) bestimmen folgende Prozesse nach [Mayer04a] die Absorption:

- Rayleigh-Streuung (H_2): $H_2 + \nu \rightarrow H_2 + \nu'$
- Kollisionsinduzierte Absorption (H_2/H_2): $H_2 + H_2 + \nu \rightarrow H_2 + H_2$
- Gebunden-gebunden-Absorption (Li): $Li + \nu \rightarrow Li^*$
- Gebunden-gebunden-Absorption (H_2): $H_2 + \nu \rightarrow H_2^*$

Damit sind nur die beiden Spezies Li und H_2 für die Berechnung der Opazität wichtig. Da deren Teilchenzahldichten von Anfang an konstant bleiben (s. Abb. 5.5 mittlere Diagramme), handelt man sich keine Fehler ein, wenn der Zeitschritt dt - die Transportzeit zwischen zwei Stützstellen - kleiner ist als die Zeit, die das Gas braucht, bis sich in ihm das chemische Gleichgewicht eingestellt hat.

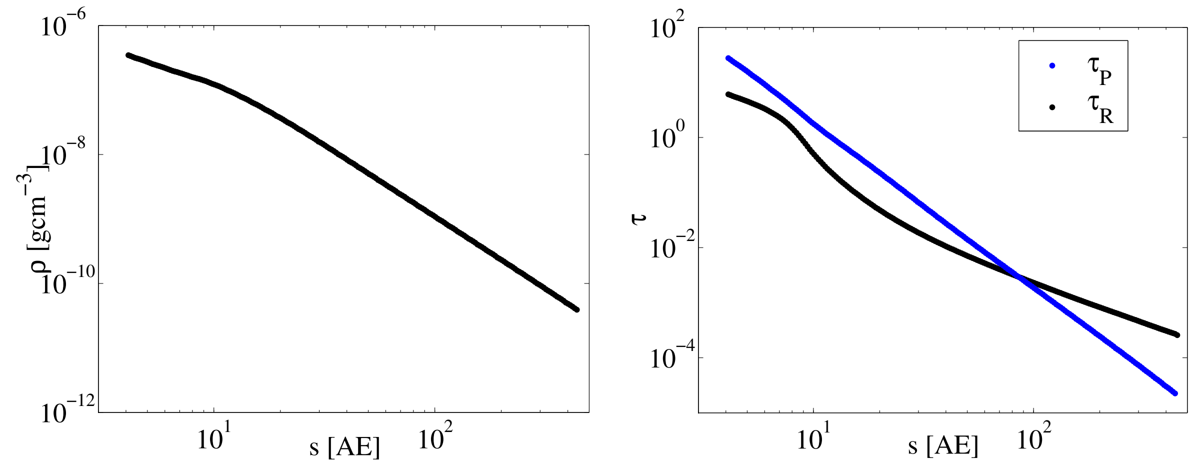


Abbildung 5.6: Dichte (**links**) und optische Tiefen (**rechts**) als Funktion des Radius für den Bereich der Akkretionsscheibe mit den niedrigsten Temperaturen.

6 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein möglichst einfaches Akkretionsscheibenmodell, das Selbstgravitation berücksichtigt, entwickelt, um Untersuchungen von chemischen Prozessen leicht in das Scheibenmodell implementieren zu können. Da der Schwerpunkt auf der Modellierung von POP-III-Scheiben lag, wurde die entsprechende (primordiale) Chemie am Anfang der Arbeit genauer untersucht. Hierzu habe ich die zeitliche Entwicklung eines Reaktionsnetzwerkes, bestehend aus Wasserstoff-, Deuterium-, Helium- und Lithiumspezies (siehe Anhang A), berechnet. Zur Überprüfung der Qualität der numerischen Lösungsmethode wurde die chemische Entwicklung eines bereits untersuchten Reaktionsnetzwerkes [Stancil98] berechnet und die Ergebnisse wurden verglichen. Obwohl ich die Gastemperatur nur durch einen Fit an Daten aus [Puy93] genähert habe, stimmten die berechneten und die zu erwartenden zeitlichen Entwicklungen der chemischen Spezies sehr gut überein. Eines meiner zukünftigen Vorhaben ist es, die zeitliche Änderung der Gastemperatur, die unter anderem durch die Heiz- und Kühleigenschaften der Moleküle LiH, H_2 und HD und deren Teilchenzahldichten bestimmt wird, mit der Gleichung (2.13) zu berechnen. Somit könnten weitere Details der Chemie des frühen Universums analysiert werden. Was passiert beispielsweise, wenn die Li-Spezies nicht berücksichtigt werden? Ohne die Kühlung durch die LiH-Moleküle wäre die Gastemperatur deutlich größer und es würde weniger H_2 aufgebaut werden.
Anschließend wurden die chemischen Eigenschaften dieses primordialen Reaktionsnetzwerkes untersucht. Hierbei wurde besonderes Augenmerk auf die Bestimmung der Reaktionszeitskalen gerichtet. Dies diente der direkten Vorbereitung auf das fünfte Kapitel, in dem die Einstellzeit des chemischen Gleichgewichtes ermittelt wurde.
Nach Beendigung der Untersuchungen zur Chemie wurde ein Modell für stationäre, geometrisch dünne und axialsymmetrische Scheiben entwickelt. Dieses Modell beschreibt Bereiche der Scheibe, die nicht-selbstgravitierend, Kepler selbstgravitierend und vollständig selbstgravitierend sind. Die Eigengravitation, die durch die Scheibenmasse verursacht wird, wurde in dieser Arbeit mit berücksichtigt, da sie in den äußeren Scheibenbereichen eine wichtige Rolle spielt. Dies erforderte jedoch eine recht grobe Näherung (die Monopol-Näherung), die es ermöglichte, Lösungen zu erhalten, die nicht von der globalen Massenverteilung der Scheibe abhängig sind. Da diese Lösungen nicht an die radiale Struktur der Scheibe koppeln, war es relativ einfach möglich, die chemische Entwicklung des Materiepaketes im fünften Kapitel zu erhalten. Wie gut die Monopol-Näherung ist, bleibt noch zu untersuchen.

Besonderes Augenmerk sei auch auf die Viskositätsbeschreibungen gerichtet. Für den Fall, dass die Turbulenzgeschwindigkeit kleiner als die isotherme Schallgeschwindigkeit war, wurde die β-Viskosität verwendet. Entsprach die Turbulenzgeschwindigkeit der Schallgeschwindigkeit, wurde die Viskositätsbeschreibung für den stoßdissipativen Grenzfall (Parameter γ) angewandt. An der Stelle, an der der Viskositätsübergang erfolgte, konnte eine Bedingung für den Parameter γ abgeleitet werden. Dieser ist, unabhängig von der genauen Wahl von β, auf den Wert eins festgelegt. Im Falle einer nicht-selbstgravitierenden Scheibe bedeutet $\gamma = 1.0$ automatisch auch, dass der Parameter α gleich eins ist. Damit ist die Abschätzung von γ sehr gut, denn der erwartete Wert für α liegt nahe eins mit $\alpha < 1.0$.
Durch die Verwendung von analytischen Opazitätsformeln wurden analytische Größenordnungs-Abschätzungen der Scheibenlösungen erhalten. Für eine protoplanetare und eine milchstraßenartige Akkretionsscheibe konnten so erste Eindrücke über die Scheibengrößen gewonnen werden.
Anschließend wurden numerische Lösungen der stationären Scheiben berechnet und diese daraufhin mit den analytischen verglichen. Anstelle der analytischen Fitformeln wurden Opazitätstabellen verwendet. Die Modellierung von POP-III-Scheiben war nun möglich. Wie in [Mayer04b] wurden auch in dieser Arbeit im Falle der protoplanetaren Akkretionsscheibe primordiale Scheiben mit POP-I-Scheiben verglichen. Die prinzipiellen Kurvenverläufe der Temperatur waren für beide Scheibentypen mit denen aus der o.g. Veröffentlichung gleich. Es zeigte sich, dass sich die Struktur der primordialen Scheiben deutlich von der heutiger Scheiben unterscheidet (isothermer Außenbereich etc.). Beim Vergleichen der beiden Arbeiten fielen insbesondere im radialen Verlauf des Verhältnisses von Höhe h zum Radius s deutliche Unterschiede auf. In [Mayer04b] stiegen die Kurven für h/s so weit an, bis die Bedingung für dünne Scheiben $h \ll s$ nicht mehr erfüllt werden konnte. In meinem Scheibenmodell blieb dieses Verhältnis im Falle eines selbstgravitierenden Außenbereiches wie die Temperatur konstant und die Bedingung $h \ll s$ konnte stets erfüllt werden. Dies ist der Grund dafür, dass die in dieser Arbeit berechneten Scheiben eine größere radiale Ausdehnung als die Scheiben in [Mayer04b] besitzen. Weiterhin fiel auf, dass die radialen Verläufe der Flächendichte der protoplanetaren Scheibe denen aus der Veröffentlichung nur wenig glichen. Im Gegensatz dazu sahen die Kurvenverläufe der Flächendichte der anschließend simulierten milchstraßenartigen Akkretionsscheibe denen aus [Mayer04b] deutlich ähnlicher. Es stellte sich heraus, dass dies unmittelbar mit der Viskositätsbeschreibung zusammenhängt. Die Autoren von [Mayer04b] verwenden eine Viskositätsbeschreibung, die der Viskosität im stoßdissipativen Grenzfall entspricht. Im Falle der milchstraßenähnlichen Akkretionsscheibe wurden die Lösungen über weite Bereiche der Scheibe mit genau dieser Viskositätsbeschreibung erhalten. Bei der protoplanetaren Scheibe sind vor allem Lösungen, die mittels β-Viskosität berechnet wurden, selbstkonsistent. Damit kann Folgendes geschlussfolgert werden: die alleinige Verwendung einer Viskosität für Scheiben im stoßdissipativen Limes ist nicht ausreichend, da die Turbulenzgeschwindigkeit kleiner als die Schallgeschwindigkeit werden kann. Dieser Fall benötigt jedoch eine Beschreibung durch die β-Viskosität.

Im letzten Kapitel wurde in einer der zuvor numerisch berechneten protoplanetaren Scheiben die Chemie untersucht. Dazu wurde die chemische Entwicklung eines Materiepaketes, das vom Scheibenrand Richtung Zentralmasse transportiert wird, bestimmt. An repräsentativen Punkten der Scheibe wurden die chemische und viskose Zeitskala miteinander verglichen. In dieser modellierten Akkretionsscheibe wurde das chemische Gleichgewicht innerhalb der Gasmischung stets erreicht. Somit ist die Voraussetzung für die Berechnung der POP-III-Opazitäten, dass die Chemie im Gleichgewicht sein muss, für dieses Scheibenbeispiel erfüllt. Allgemein gültige Aussagen können aus diesen Ergebnissen zwar nicht geschlussfolgert werden, aber das Ziel meiner Diplomarbeit, chemische Entwicklungen innerhalb von Akkretionsscheiben untersuchen zu können, wurde erreicht. Dies kann nun in Zukunft weiter ausgebaut werden.

Anhang A

Netzwerkreaktionen

Reaktion	Ratenkoeffizent
$H^+ + e^- \rightarrow H + \nu$	$k_1 = 3.6 \cdot 10^{-12}\,(T_{gas}/300)^{-0.75}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + \nu \rightarrow H^+ + e^-$	$k_2 = 1.14 \cdot 10^{7}\,(T_{rad}/300)^{0.98}\,e^{-157000/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$H + e^- \rightarrow H^- + \nu$	$k_3 = 3.0 \cdot 10^{-16}\,(T_{gas}/300)^{0.95}\,e^{-T_{gas}/9320}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^- + \nu \rightarrow H + e^-$	$k_4 = 2.08 \cdot 10^{4}\,(T_{rad}/300)^{2.13}\,e^{-8820/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$H^- + H^+ \rightarrow H + H$	$k_5 = 4.0 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + H^+ \rightarrow H_2^+ + \nu$	$k_6 = 6.0 \cdot 10^{-19}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + \nu \rightarrow H + H^+$	$k_7 = 1.63 \cdot 10^{7}\,e^{-32400/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$H^- + H^+ \rightarrow H_2^+ + e^-$	$k_8 = 1.0 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.4}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + e^- \rightarrow H + H$	$k_9 = 1.2 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.4}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H \rightarrow H_2 + H^+$	$k_{10} = 6.4 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H^- \rightarrow H_2 + H$	$k_{11} = 1.4 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H^- \rightarrow H + H + H$	$k_{12} = 1.4 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + H^- \rightarrow H_2 + e^-$	$k_{13} = 1.5 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.1}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + H$	$k_{14} = 2.24 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{0.042}\,e^{-T_{gas}/46600}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2 + H^+ \rightarrow H_3^+ + \nu$	$k_{15} = 1.0 \cdot 10^{-20}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H \rightarrow H_3^+ + \nu$	$k_{16} = 1.5 \cdot 10^{-17}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_3^+ + e^- \rightarrow H_2 + H$	$k_{17} = 4.0 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_3^+ + e^- \rightarrow H + H + H$	$k_{18} = 1.6 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_3^+ + H^- \rightarrow H_2 + H + H$	$k_{19} = 2.3 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + H + H \rightarrow H_2 + H$	$k_{20} = 5.5 \cdot 10^{-29}\,T_{gas}^{-1}\,\mathrm{cm^6s^{-1}}$
$H_2 + H \rightarrow H + H + H$	$k_{21} = 6.5 \cdot 10^{-7}\,T_{gas}^{-0.5}\,e^{-52000.0/T_{gas}}(1 - e^{-6000/T_{gas}})\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + H + H_2 \rightarrow H_2 + H_2$	$k_{22} = \frac{1}{8}k_{20}$
$H_2 + H_2 \rightarrow H + H + H_2$	$k_{23} = \frac{1}{8}k_{21}$
$H^* + H \rightarrow H_2^+ + e^-$	$k_{24} = 27.2 \cdot 10^{-12}\,(T_{gas}/300)^{0.61}\,e^{-131352.09/T_{gas}}\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^* + H \rightarrow H_2 + \nu$	$k_{25} = 8.36 \cdot 10^{-14}\,(T_{gas}/300)^{0.24}\,e^{-T_{gas}/37800-10.2/kT_{gas}}\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^* + H_2 \rightarrow H_3^+ + e^-$	$k_{26} = 18.8 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,e^{-10.2/kT_{gas}}\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^* + H_2 \rightarrow H + H + H$	$k_{27} = 10.0 \cdot 10^{-11}\,e^{-10.2/kT_{gas}}\mathrm{cm^3s^{-1}}$

$H + e^- \rightarrow H^+ + e^- + e^-$	$k_{28} = 7.57 \cdot 10^{-10}\,(T_{gas}/300)^{0.55}\,e^{-158200/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + H^- \rightarrow H_3^+ + e^-$	$k_{29} = 2.7 \cdot 10^{-10}\,(T_{gas}/300)^{-0.485}\,e^{T_{gas}/31200}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^+ + e^- \rightarrow D + \nu$	$k_{30} = 3.6 \cdot 10^{-12}\,(T_{gas}/300)^{-0.75}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D + \nu \rightarrow D^+ + e^-$	$k_{31} = 1.14 \cdot 10^{7}\,(T_{rad}/300)^{0.98}\,e^{-157000/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$D + H^+ \rightarrow D^+ + H$	$k_{32} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,e^{-41/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^+ + H \rightarrow D + H^+$	$k_{33} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D + e^- \rightarrow D^- + \nu$	$k_{34} = 3.0 \cdot 10^{-16}\,(T_{gas}/300)^{0.95}\,e^{-T_{gas}/9320}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^- + \nu \rightarrow D + e^-$	$k_{35} = 2.08 \cdot 10^{4}\,(T_{rad}/300)^{2.13}\,e^{-8820/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$D^- + D^+ \rightarrow D + D$	$k_{36} = 5.7 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^+ + H^- \rightarrow D + H$	$k_{37} = 4.6 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^- + H^+ \rightarrow D + H$	$k_{38} = 4.6 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^- + D \rightarrow H + D^-$	$k_{39} = 6.4 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{0.41}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^- + H \rightarrow D + H^-$	$k_{40} = 6.4 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{0.41}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + D^+ \rightarrow HD^+ + \nu$	$k_{41} = 3.9 \cdot 10^{-19}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + \nu \rightarrow H + D^+$	$k_{42} = 1.63 \cdot 10^{7}\,e^{-32400/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$D + H^+ \rightarrow HD^+ + \nu$	$k_{43} = 3.9 \cdot 10^{-19}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + \nu \rightarrow D + H^+$	$k_{44} = 1.63 \cdot 10^{7}\,e^{-32400/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$H_2^+ + D \rightarrow HD^+ + H$	$k_{45} = 1.07 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{0.062}\,e^{-T_{gas}/41400}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + D \rightarrow H_2 + D^+$	$k_{46} = 6.4 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + e^- \rightarrow H + D$	$k_{47} = 3.4 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.4}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + H \rightarrow HD + H^+$	$k_{48} = 6.4 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + H \rightarrow H_2^+ + D$	$k_{49} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,e^{-154/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + D$	$k_{50} = 1.05 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + D \rightarrow HD + \nu$	$k_{51} = 1.05 \cdot 10^{-26}\,(T_{gas}/300)^{0.09}\,e^{-T_{gas}/7000}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + D + \nu_r \rightarrow HD + \nu + \nu_r$	$k_{52} = 2.0 \cdot 10^{-27}\,e^{-400/T_{rad}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$D^+ + H_2 \rightarrow H^+ + HD$	$k_{53} = 2.1 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD + H^+ \rightarrow H_2 + D^+$	$k_{54} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,e^{-457/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2 + D \rightarrow HD + H$	$k_{55} = 7.5 \cdot 10^{-11}\,e^{-3820/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD + H \rightarrow H_2 + D$	$k_{56} = 7.5 \cdot 10^{-11}\,e^{-4240/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H^- + D \rightarrow HD + e^-$	$k_{57} = 1.5 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.1}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H + D^- \rightarrow HD + e^-$	$k_{58} = 1.5 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.1}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_3^+ + HD \rightarrow H_2D^+ + H_2$	$k_{59} = 1.4 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2 + D^+ \rightarrow H_2D^+ + \nu$	$k_{60} = 1.0 \cdot 10^{-20}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD + H^+ \rightarrow H_2D^+ + \nu$	$k_{61} = 1.0 \cdot 10^{-20}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2^+ + D \rightarrow H_2D^+ + \nu$	$k_{62} = 7.0 \cdot 10^{-18}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + H \rightarrow H_2D^+ + \nu$	$k_{63} = 1.2 \cdot 10^{-17}\,(T_{gas}/300)^{1.8}\,e^{20/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2D^+ + e^- \rightarrow H + H + D$	$k_{64} = 4.38 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2D^+ + e^- \rightarrow H_2 + D$	$k_{65} = 4.2 \cdot 10^{-9}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_2D^+ + e^- \rightarrow H + HD$	$k_{66} = 1.2 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$HD^+ + H_2 \rightarrow H_2D^+ + H$	$k_{67} = 1.05 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$H_3^+ + D \rightarrow H_2D^+ + H$	$k_{68} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$

$HD + H_2^+ \rightarrow H_2D^+ + H$	$k_{69} = 1.05 \cdot 10^{-9}\, cm^3s^{-1}$
$HD + H_2^+ \rightarrow H_3^+ + D$	$k_{70} = 1.05 \cdot 10^{-9}\, cm^3s^{-1}$
$H_2D^+ + H \rightarrow H_3^+ + D$	$k_{71} = 1.0 \cdot 10^{-9}\, e^{-632/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$H_2D^+ + H_2 \rightarrow H_3^+ + HD$	$k_{72} = 1.7 \cdot 10^{-9}\, e^{-150/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$H^* + D \rightarrow HD^+ + e^-$	$k_{73} = 22.8 \cdot 10^{-12}\, (T_{gas}/300)^{0.61}\, e^{-131352.09/T_{gas}} cm^3s^{-1}$
$D^* + H \rightarrow HD^+ + e^-$	$k_{74} = 22.8 \cdot 10^{-12}\, (T_{gas}/300)^{0.61}\, e^{-131352.09/T_{gas}} cm^3s^{-1}$
$H^* + D \rightarrow HD + \nu$	$k_{75} = 8.0 \cdot 10^{-14}\, (T_{gas}/300)^{0.24}\, e^{-T_{gas}/37800-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$D^* + H \rightarrow HD + \nu$	$k_{76} = 8.0 \cdot 10^{-14}\, (T_{gas}/300)^{0.24}\, e^{-T_{gas}/37800-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$H^* + HD \rightarrow H_2D^+ + e^-$	$k_{77} = 21.6 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{-0.5}\, e^{-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$D^* + H_2 \rightarrow H_2D^+ + e^-$	$k_{78} = 23.2 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{-0.5}\, e^{-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$H^* + HD \rightarrow H + H + D$	$k_{79} = 10.0 \cdot 10^{-11}\, e^{-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$D^* + H_2 \rightarrow H + H + D$	$k_{80} = 10.0 \cdot 10^{-11}\, e^{-10.2/kT_{gas}} cm^3s^{-1}$
$D + e^- \rightarrow D^+ + e^- + e^-$	$k_{81} = 7.57 \cdot 10^{-10}\, (T_{gas}/300)^{0.55}\, e^{-158200/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$H_2^+ + D^- \rightarrow H_2D^+ + e^-$	$k_{82} = 2.24 \cdot 10^{-10}\, (T_{gas}/300)^{-0.49}\, e^{T_{gas}/43600}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + e^- \rightarrow He + \nu$	$k_{83} = 4.51 \cdot 10^{-12}\, (T_{gas}/300)^{-0.67}\, cm^3s^{-1}$
$He + \nu \rightarrow He^+ + e^-$	$k_{84} = 1.11 \cdot 10^{7}\, (T_{rad}/300)^{1.23}\, e^{-280000/T_{rad}}\, s^{-1}$
$He^+ + H \rightarrow He + H^+ + \nu$	$k_{85} = 1.2 \cdot 10^{-15}\, (T_{gas}/300)^{0.25}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + H^- \rightarrow He + H$	$k_{86} = 2.32 \cdot 10^{-7}\, (T_{gas}/300)^{-0.52}\, e^{T_{gas}/22400}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + D \rightarrow He + D^+ + \nu$	$k_{87} = 1.1 \cdot 10^{-15}\, (T_{gas}/300)^{0.25}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + D^- \rightarrow He + D$	$k_{88} = 3.03 \cdot 10^{-7}\, (T_{gas}/300)^{-0.52}\, e^{T_{gas}/22400}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + H_2 \rightarrow He + H_2^+ + \nu$	$k_{89} = 7.2 \cdot 10^{-15}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + H_2 \rightarrow He + H + H^+$	$k_{90} = 3.7 \cdot 10^{-14}\, e^{-35/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$He + H^+ \rightarrow HeH^+ + \nu$	$k_{91} = 8.0 \cdot 10^{-20}\, (T_{gas}/300)^{-0.24}\, e^{-T_{gas}/4000}\, cm^3s^{-1}$
$He + H^+ + \nu_r \rightarrow HeH^+ + \nu + \nu_r$	$k_{92} = 1.5 \cdot 10^{-20}\, e^{-200/T_{rad}}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + \nu \rightarrow He + H^+$	$k_{93} = 0.68 \cdot T_{rad}^{\,1.5}\, e^{-22750/T_{rad}}\, s^{-1}$
$He^+ + H \rightarrow HeH^+ + \nu$	$k_{94} = 4.16 \cdot 10^{-16}\, (T_{gas}/300)^{-0.37}\, e^{-T_{gas}/87600}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + H \rightarrow He + H_2^+$	$k_{95} = 1.04 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{0.13}\, e^{-T_{gas}/33100}\, cm^3s^{-1}$
$He + H_2^+ \rightarrow HeH^+ + H$	$k_{96} = 3.0 \cdot 10^{-10}\, e^{-6720/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + e^- \rightarrow He + H$	$k_{97} = 3.0 \cdot 10^{-8}\, (T_{gas}/300)^{-0.47}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + H_2 \rightarrow He + H_3^+$	$k_{98} = 1.53 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{0.24}\, e^{-T_{gas}/14800}\, cm^3s^{-1}$
$He^+ + D \rightarrow HeD^+ + \nu$	$k_{99} = 5.0 \cdot 10^{-16}\, (T_{gas}/300)^{-0.37}\, e^{-T_{gas}/87600}\, cm^3s^{-1}$
$He + D^+ \rightarrow HeD^+ + \nu$	$k_{100} = 1.0 \cdot 10^{-19}\, (T_{gas}/300)^{-0.24}\, e^{-T_{gas}/4000}\, cm^3s^{-1}$
$He + D^+ + \nu_r \rightarrow HeD^+ + \nu + \nu_r$	$k_{101} = 1.5 \cdot 10^{-21}\, e^{-200/T_{rad}}\, cm^3s^{-1}$
$HeD^+ + \nu \rightarrow He + D^+$	$k_{102} = 0.68 \cdot T_{rad}^{\,1.5}\, e^{-22750/T_{rad}}\, s^{-1}$
$HeH^+ + D \rightarrow HeD^+ + H$	$k_{103} = 1.0 \cdot 10^{-9}\, cm^3s^{-1}$
$HeD^+ + H \rightarrow HeH^+ + D$	$k_{104} = 8.0 \cdot 10^{-10}\, e^{-468/T_{gas}}\, cm^3s^{-1}$
$HeD^+ + H \rightarrow He + HD^+$	$k_{105} = 9.1 \cdot 10^{-10}\, (T_{gas}/300)^{0.13}\, e^{-T_{gas}/33100}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + D \rightarrow He + HD^+$	$k_{106} = 8.5 \cdot 10^{-10}\, (T_{gas}/300)^{0.13}\, e^{-T_{gas}/33100}\, cm^3s^{-1}$
$HeD^+ + e^- \rightarrow He + D$	$k_{107} = 3.0 \cdot 10^{-8}\, (T_{gas}/300)^{-0.47}\, cm^3s^{-1}$
$HeD^+ + H_2 \rightarrow He + H_2D^+$	$k_{108} = 1.24 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{0.24}\, e^{-T_{gas}/14800}\, cm^3s^{-1}$
$HeH^+ + HD \rightarrow He + H_2D^+$	$k_{109} = 1.2 \cdot 10^{-9}\, (T_{gas}/300)^{0.24}\, e^{-T_{gas}/14800}\, cm^3s^{-1}$

$He^+ + HD \rightarrow He + H^+ + D$	$k_{110} = 5.5 \cdot 10^{-14}\,(T_{gas}/300)^{-0.24}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He^+ + HD \rightarrow He + H + D^+$	$k_{111} = 5.5 \cdot 10^{-14}\,(T_{gas}/300)^{-0.24}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He + HD^+ \rightarrow HeH^+ + D$	$k_{112} = 3.0 \cdot 10^{-10}\,e^{-6720/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He + HD^+ \rightarrow HeD^+ + H$	$k_{113} = 3.0 \cdot 10^{-10}\,e^{-6720/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He + He^+ \rightarrow He_2^+ + \nu$	$k_{114} = 4.76 \cdot 10^{-20}\,(T_{gas}/300)^{1.82}\,e^{29/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He_2^+ + \nu \rightarrow He + He^+$	$k_{115} = k_{114} \cdot 10^{11.1899+3.038\cdot10^{-4}T_{rad}-12603/T_{gas}}/kT_{rad}\,\mathrm{cm^{-3}}$
$He_2^+ + e^- \rightarrow He + He$	$k_{116} = 5.0 \cdot 10^{-10}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He_2^+ + H \rightarrow He + He + H^+$	$k_{117} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$He + e^- \rightarrow He^+ + e^- + e^-$	$k_{118} = 4.12 \cdot 10^{-10}\,(T_{gas}/300)^{0.5}\,e^{-285000/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^+ + e^- \rightarrow Li + \nu$	$k_{119} = 3.1 \cdot 10^{-12}\,(T_{gas}/300)^{-0.68}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + \nu \rightarrow Li^+ + e^-$	$k_{120} = 5.08 \cdot 10^{6}\,(T_{rad}/300)^{1.45}\,e^{-60500/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$Li^+ + H^- \rightarrow Li + H$	$k_{121} = 1.2 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.36}\,e^{T_{gas}/16500}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + H^+ \rightarrow Li^+ + H$	$k_{122} = 4.0 \cdot 10^{-20}\,(T_{gas}/300)^{6.8}\,e^{-T_{gas}/1800}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + H^+ \rightarrow Li^+ + H + \nu$	$k_{123} = 2.3 \cdot 10^{-14}\,(T_{gas}/300)^{0.55}\,e^{-T_{gas}/10000}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + e^- \rightarrow Li^- + \nu$	$k_{124} = 1.85 \cdot 10^{-15}\,(T_{gas}/300)^{-0.62}\,e^{-T_{gas}/9300}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^- + \nu \rightarrow Li + e^-$	$k_{125} = 5.29 \cdot 10^{5}\,(T_{rad}/300)^{1.4}\,e^{-8100/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$Li^- + H^+ \rightarrow Li + H$	$k_{126} = 1.2 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.36}\,e^{T_{gas}/16500}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^+ + H \rightarrow LiH^+ + \nu$	$k_{127} = 8.0 \cdot 10^{-23}\,(T_{gas}/300)^{-0.9}\,e^{-T_{gas}/7000}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + \nu \rightarrow H + Li^+$	$k_{128} = 700.0 \cdot e^{-1900/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$Li + H^+ \rightarrow LiH^+ + \nu$	$k_{129} = 3.25 \cdot 10^{-15}\,(T_{gas}/300)^{-0.49}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + \nu \rightarrow H^+ + Li$	$k_{130} = 3.35 \cdot 10^{7}\,T_{rad}\,e^{-97000/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$LiH^+ + e^- \rightarrow Li + H$	$k_{131} = 2.6 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{-0.47}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + H \rightarrow Li + H_2^+$	$k_{132} = 9.0 \cdot 10^{-10}\,e^{-66400/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + H \rightarrow Li^+ + H_2$	$k_{133} = 3.0 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + H \rightarrow LiH + H^+$	$k_{134} = 1.0 \cdot 10^{-11}\,e^{-67900/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + H \rightarrow LiH + \nu$	$k_{135} = 3.8 \cdot 10^{-20}\,(T_{gas}/300)^{-0.28}\,e^{-T_{gas}/3300}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + \nu \rightarrow Li + H$	$k_{136} = 8.3 \cdot 10^{4}\,T_{rad}^{0.3}\,e^{-29000/T_{rad}}\,\mathrm{s^{-1}}$
$Li + H^- \rightarrow LiH + e^-$	$k_{137} = 4.0 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^- + H \rightarrow LiH + e^-$	$k_{138} = 4.0 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + H^+ \rightarrow LiH^+ + H$	$k_{139} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + H \rightarrow Li + H_2$	$k_{140} = 2.0 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + H^+ \rightarrow Li^+ + H_2$	$k_{141} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + H^+ \rightarrow Li + H_2^+$	$k_{142} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + D^+ \rightarrow Li^+ + D + \nu$	$k_{143} = 1.1 \cdot 10^{-13}\,(T_{gas}/300)^{-0.051}\,e^{-T_{gas}/282000}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^+ + D^- \rightarrow Li + D$	$k_{144} = 2.06 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,e^{T_{gas}/18300}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li + D^+ \rightarrow Li^+ + D$	$k_{145} = 8.0 \cdot 10^{-22}\,(T_{gas}/300)^{6.8}\,e^{-T_{gas}/1800}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$Li^- + D^+ \rightarrow Li + D$	$k_{146} = 2.06 \cdot 10^{-7}\,(T_{gas}/300)^{-0.5}\,e^{T_{gas}/18300}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + D \rightarrow Li + HD^+$	$k_{147} = 9.0 \cdot 10^{-10}\,e^{-66400/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + D \rightarrow Li^+ + HD$	$k_{148} = 3.0 \cdot 10^{-10}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH^+ + D \rightarrow LiH + D^+$	$k_{149} = 1.0 \cdot 10^{-11}\,e^{-67900/T_{gas}}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$
$LiH + D^+ \rightarrow LiH^+ + D$	$k_{150} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{cm^3s^{-1}}$

$LiH + D \rightarrow Li + HD$	$k_{151} = 2.0 \cdot 10^{-11}\,cm^3s^{-1}$
$LiH + D^+ \rightarrow Li^+ + HD$	$k_{152} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,cm^3s^{-1}$
$LiH + D^+ \rightarrow Li + HD^+$	$k_{153} = 1.0 \cdot 10^{-9}\,cm^3s^{-1}$
$Li + e^- \rightarrow Li^+ + e^- + e^-$	$k_{154} = 3.11 \cdot 10^{-8}\,(T_{gas}/300)^{0.163}\,e^{-62700/T_{gas}}\,cm^3s^{-1}$

Tabelle A.1: Reaktionen mit den dazugehörigen Ratenkoeffizenten

Anhang B

Stationäre Scheibenmodelle

Die in dieser Arbeit verwendeten drei Scheibenmodelle NSG (A=1, B=0), KSG (A=1, B=1) und FSG (A=0, B=1) werden durch diese Gleichungen beschrieben:

- Drehimpulserhaltung:

$$\nu\Sigma = \frac{\dot{M}}{3\pi\xi} \tag{B.1}$$

- Einzonennäherung:

$$\Sigma = 2h\rho \tag{B.2}$$

- Scheibenmasse:

$$M_D = \pi s^2 \Sigma \tag{B.3}$$

- Azimutale Geschwindigkeit:

$$v_\varphi^2 = \omega^2 s^2 = \frac{G M_*^A M_D^{1-A}}{s} \tag{B.4}$$

- Hydrostatisches Gleichgewicht in vertikaler Richtung:

$$\frac{h}{s} = \left(\frac{1}{2}\right)^B \left(\frac{M_*}{M_D}\right)^{AB} \left(\frac{c_\mathrm{s}}{v_\varphi}\right)^{1+B} \tag{B.5}$$

- Energiegleichung:

$$\frac{4\sigma}{3\tau_\mathrm{eff}} T^4 = \frac{9}{8}\xi^2 \nu\Sigma\omega^2 \tag{B.6}$$

- Optische Tiefe:

$$\tau_\mathrm{eff} = \tau_\mathrm{R} + \frac{4}{3} + \frac{2}{3\tau_\mathrm{P}} \qquad \text{mit} \qquad \tau_\mathrm{R/P} = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_\mathrm{R/P} \tag{B.7}$$

- Zustandsgleichung:
$$P = \frac{\rho R T}{\mu} \tag{B.8}$$
- Isotherme Schallgeschwindigkeit:
$$c_\mathrm{s}^2 = \frac{P}{\rho} \tag{B.9}$$
- Viskosität:
$$\nu^{(\beta)} = \beta s^2 \omega \tag{B.10}$$
$$\nu^{(DL)} = \gamma \frac{c_\mathrm{s}^2}{\omega}\,. \tag{B.11}$$

Nicht-selbstgravitierende β-Scheiben

(B.1) und (B.10) in (B.7):

$$\tau_\mathrm{eff} = \frac{1}{2}\Sigma\kappa_\mathrm{R} + \frac{4}{3} + \frac{4}{3\Sigma\kappa_\mathrm{P}} = \frac{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{R}}{6\pi\xi\beta s^2\omega} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\beta s^2\omega}{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{P}} \tag{B.12}$$

(B.4) in (B.12):

$$\tau_\mathrm{eff} = \frac{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{R}}{6\pi\xi\beta\sqrt{GM_* s}} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\beta\sqrt{GM_* s}}{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{P}} \tag{B.13}$$

(B.1) und (B.4) in (B.6):

$$\frac{4\sigma}{3\tau_\mathrm{eff}}T^4 = \frac{9}{8}\xi^2\frac{\dot{\mathrm{M}}}{3\pi\xi}\omega^2 = \frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\mathrm{M}}GM_*}{\pi s^3} \tag{B.14}$$

(B.5) und (B.8) in (B.9):

$$c_\mathrm{s}^2 = \frac{RT}{\mu} = h^2\omega^2 \tag{B.15}$$

(B.1) und (B.2) in (B.15):

$$\frac{RT}{\mu} = \frac{\Sigma^2}{4\rho^2}\omega^2 = \frac{\dot{\mathrm{M}}^2\omega^2}{36\rho^2\pi^2\xi^2\beta^2 s^4\omega^2} = \left(\frac{\dot{\mathrm{M}}}{6\pi\xi\rho\beta s^2}\right)^2 \tag{B.16}$$

Nicht-selbstgravitierende Scheiben im stoßdissipativen Limes

(B.1) und (B.11) in (B.7):

$$\tau_\mathrm{eff} = \frac{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{R}\omega}{6\pi\xi\gamma c_\mathrm{s}^2} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\gamma c_\mathrm{s}^2}{\dot{\mathrm{M}}\kappa_\mathrm{P}\omega} \tag{B.17}$$

(B.4) und (B.15) in (B.17):

$$\tau_{\text{eff}} = \frac{\dot{\text{M}}\kappa_{\text{R}}\mu\sqrt{GM_*/s^3}}{6\pi\xi\gamma RT} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\gamma RT}{\dot{\text{M}}\kappa_{\text{P}}\mu\sqrt{GM_*/s^3}} \tag{B.18}$$

Weiterhin erhält man durch Umformung der Energiegleichung die Gleichung (B.14).
(B.1) und (B.2) in (B.15):

$$\frac{RT}{\mu} = \frac{\Sigma^2}{4\rho^2}\omega^2 = \frac{\dot{\text{M}}^2\omega^2}{36\rho^2\pi^2\xi^2\nu^2} \overset{(B.11)}{=} \frac{\dot{\text{M}}^2\omega^4}{36\rho^2\pi^2\xi^2\gamma^2c_{\text{s}}^4} \tag{B.19}$$

$$\Rightarrow \qquad \left(\frac{RT}{\mu}\right)^3 = \left(\frac{\dot{\text{M}}GM_*}{6\pi\xi\rho\gamma s^3}\right)^2 \tag{B.20}$$

Kepler selbstgravitierende β-Scheiben

Wie im Falle von NSG-β-Scheiben erhält man

$$\tau_{\text{eff}} = \frac{\dot{\text{M}}\kappa_{\text{R}}}{6\pi\xi\beta\sqrt{GM_*s}} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\beta\sqrt{GM_*s}}{\dot{\text{M}}\kappa_{\text{P}}}$$

$$\frac{4\sigma}{3\tau_{\text{eff}}}T^4 = \frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\text{M}}GM_*}{\pi s^3}$$

(B.5) und (B.8) zusammen mit (B.9):

$$c_{\text{s}}^2 = \frac{RT}{\mu} = 2h\frac{M_D}{M_*}s\omega^2 \overset{(B.2)}{=} \frac{\Sigma}{\rho}\frac{M_D}{M_*}s\omega^2 \tag{B.21}$$

(B.3) und (B.1) in (B.21):

$$\frac{RT}{\mu} = \frac{\Sigma^2\pi s^3\omega^2}{\rho M_*} = \left(\frac{\dot{\text{M}}}{3\pi\xi}\right)^2\frac{\pi s^3\omega^2}{\beta^2 s^4\omega^2\rho M_*} \tag{B.22}$$

$$\Rightarrow \qquad \frac{RT}{\mu} = \left(\frac{\dot{\text{M}}}{3\beta\xi}\right)^2\frac{1}{\pi s\rho M_*} \tag{B.23}$$

Kepler selbstgravitierende Scheiben im stoßdissipativen Limes

Die optische Tiefe τ_{eff} und die Energiegleichung entsprechen denen für nicht-selbstgravitierende Scheiben im stoßdissipativen Limes: (B.18) und (B.14).
(B.22) mit (B.11) anstelle der β-Viskosität:

$$\frac{RT}{\mu} = \left(\frac{\dot{\text{M}}}{3\pi\xi}\right)^2\frac{\pi s^3\omega^4}{\gamma^2c_{\text{s}}^4\rho M_*} \overset{(B.4)}{=} \left(\frac{\dot{\text{M}}}{3\gamma\xi}\right)^2\frac{s^3G^2M_*^2}{\pi c_{\text{s}}^4\rho M_* s^6} \tag{B.24}$$

$$\Rightarrow \qquad \left(\frac{RT}{\mu}\right)^3 = \left(\frac{\dot{\mathrm{M}}G}{3\gamma\xi}\right)^2 \frac{M_*}{s^3\rho\pi} \tag{B.25}$$

Selbstgravitierende β-Scheiben

(B.3) und (B.1) in (B.4):

$$\omega^2 s^2 = \frac{GM_D}{s} = \frac{G\pi s^2\Sigma}{s} = \frac{G\pi s\dot{\mathrm{M}}}{3\pi\xi\beta s^2\omega} \tag{B.26}$$

$$\Rightarrow \qquad \omega = \left(\frac{G\dot{\mathrm{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{s} \tag{B.27}$$

(B.27) in (B.12):

$$\tau_{\mathrm{eff}} = \frac{\dot{\mathrm{M}}\kappa_{\mathrm{R}}}{6\pi\xi\beta s}\left(\frac{G\dot{\mathrm{M}}}{3\xi\beta}\right)^{-\frac{1}{3}} + \frac{4}{3} + \frac{4\pi\xi\beta s}{\dot{\mathrm{M}}\kappa_{\mathrm{P}}}\left(\frac{G\dot{\mathrm{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{B.28}$$

(B.1) und (B.27) in (B.6):

$$\frac{4\sigma}{3\tau_{\mathrm{eff}}}T^4 = \frac{9}{8}\xi^2\frac{\dot{\mathrm{M}}}{3\pi\xi}\omega^2 = \frac{3}{8}\frac{\xi\dot{\mathrm{M}}}{\pi s^2}\left(\frac{G\dot{\mathrm{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{2}{3}} \tag{B.29}$$

(B.5) und (B.8) in (B.9):

$$c_{\mathrm{s}}^2 = \frac{RT}{\mu} = 2h\omega^2 s \overset{(B.2)}{=} \frac{\Sigma\,\omega^2 s}{\rho} \overset{(B.1)}{=} \frac{\dot{\mathrm{M}}\omega^2 s}{3\pi\xi\rho\beta s^2\omega} = \frac{\dot{\mathrm{M}}\omega}{3\pi\xi\rho\beta s} \tag{B.30}$$

(B.27) in (B.30):

$$\Rightarrow \qquad \frac{RT}{\mu} = \frac{\dot{\mathrm{M}}}{3\pi\xi\rho\beta s^2}\left(\frac{G\dot{\mathrm{M}}}{3\xi\beta}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{B.31}$$

Selbstgravitierende Scheiben im stoßdissipativen Limes

(B.26) mit (B.11) anstelle der β-Viskosität:

$$\omega = \frac{G\pi\dot{\mathrm{M}}}{3s\pi\xi\gamma c_{\mathrm{s}}^2} = \frac{G\dot{\mathrm{M}}\mu}{3s\xi\gamma RT} \tag{B.32}$$

(B.32) in (B.17):

$$\tau_{\mathrm{eff}} = \frac{\dot{\mathrm{M}}^2\kappa_{\mathrm{R}}G\mu^2}{18\pi\xi^2\gamma^2 sR^2T^2} + \frac{4}{3} + \frac{12\pi\xi^2\gamma^2 sR^2T^2}{\dot{\mathrm{M}}^2\kappa_{\mathrm{P}}G\mu^2} \tag{B.33}$$

(B.1) und (B.32) in (B.6):

$$\frac{4\sigma}{3\tau_{\rm eff}}T^4 = \frac{9}{8}\xi^2\frac{\dot{\rm M}}{3\pi\xi}\omega^2 = \frac{\dot{\rm M}}{24\xi\pi}\left(\frac{G\dot{\rm M}\mu}{s\gamma RT}\right)^2 \tag{B.34}$$

(B.30) mit (B.11) anstelle der β-Viskosität:

$$\frac{RT}{\mu} = \frac{\dot{\rm M}\omega^3 s}{3\pi\xi\rho\gamma c_{\rm s}^2} \tag{B.35}$$

(B.32) in (B.35):

$$\frac{RT}{\mu} = \frac{\dot{\rm M}s\mu}{3\pi\xi\rho\gamma RT}\left(\frac{G\dot{\rm M}\mu}{3s\xi\gamma RT}\right)^3 \tag{B.36}$$

$$\Rightarrow \qquad \left(\frac{RT}{\mu}\right)^5 = \frac{\dot{\rm M}s}{3\pi\xi\rho\gamma}\left(\frac{G\dot{\rm M}}{3s\xi\gamma}\right)^3 \tag{B.37}$$

Anhang C

Danksagung

Mein Dank gilt allererst meinem Betreuer Prof. Wolfgang J. Duschl. Er hat meine Arbeit hier am Institut für theoretische Astrophysik ermöglicht und mit seinem ständigen Interesse und seiner Bereitschaft, immer zuzuhören, sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Prof. Matthias Bartelmann danke ich für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Michael Mayer danke ich für viele fachlich anregende und freundschaftliche Gespräche.

Ich danke den Mitgliedern der Tischtennis-Sushi-Espresso-Tee-Runde Wolfgang J. Duschl, Sebastian Hönig (meinem Tischtennis-Doppel-Partner; irgendwann werden wir über die Italiener siegen), Hannes Horst, Michael Mayer, Dominikus Heinzeller, Franck Hersant, Christan Straka und allen anderen für den Spaß innerhalb und außerhalb des Büros.

Bei allen Kollegen des Institutes bedanke ich mich für ihr kollegiales und hilfsbereites Verhalten.

Großen Dank gebührt Inge Lesanovsky für das Korrekturlesen dieser Arbeit und die Unterstützung, die sie mir zusammen mit ihrem Mann Walter gegeben hat.

Ich danke meinen Eltern für ihre fortwährende Unterstützung meines gesamten Studiums.

Zuletzt aber doch vor allem: Vielen Dank, Igor, für alles!

Literaturverzeichnis

[Arnett96] David Arnett, *Supernovae and nucleosynthesis: an investigation of the history of matter, from the Big Bang to the present*, (Princeton University Press, 1996)

[Baschek99] A. Unsöld, B. Baschek, *Der neue Kosmos*, 6. Auflage (Springer, Berlin, 1999)

[Biermann01] M. Biermann, *Akkretionsscheiben-Modelle mit einer verallgemeinerten, Reynolds-kritischen Turbulenz in aktiven galaktischen Kernen und um Protosterne*, Doktorarbeit, Universität Heidelberg (2001)

[Duschl00] W.J. Duschl, P.A. Strittmatter and P.L. Biermann, *A note on hydrodynamic viscosity and selfgravitation in accretion disks*, Astron. Astrophys. 357, 1123-1132, (2000)

[Duschl] Prof. Duschl, Vorlesungsmitschrift *Akkretionsscheiben*

[Ehrig00] R. Ehrig, U. Nowak, LIMEX Version 4.2A1 (2000)
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik, Berlin
URL: http://www.zib.de/ehrig/software.html

[Finocchi96] F. Finocchi, *Chemische Reaktionen und Staubzerstörung in protoplanetaren Akkretionsscheiben*, Doktorarbeit, Universität Heidelberg (1996)

[Frank02] Juhan Frank, Andrew King, Derek Raine, *Accretion power in astrophysics*, 3. Auflage (Cambridge University Press, 2002)

[Gail] Prof. Gail, Vorlesungsskript *Entstehung von Planetensystemen*

[Galli98] Daniele Galli and Francesco Palla, *The chemistry of the early Universe*, Astron. Astrophys. 335, 403-420, (1998)

[Kippenhahn90] R. Kippenhahn, A. Weigert, *Stellar Structure and Evolution*, (Springer, Berlin, 1990)

[Lepp02] S. Lepp, P.C. Stancil, and A. Dalgarno, *Atomic and molekular processes in the early Universe*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35**, (2002) R57-R80

[Mayer02] Michael Mayer, *Zur Modellierung von Population III-Akkretionsscheiben*, Diplomarbeit, Universität Heidelberg, (2002)

[Mayer04a] Michael Mayer and Wolfgang J. Duschl, *Opacities for primordial matter*, MNRAS subm.

[Mayer04b] Michael Mayer and Wolfgang J. Duschl, *Stationary Population III accretion discs*, MNRAS subm. (astro-ph/0406501)

[Palla83] Francesco Palla, E. E. Salpeter and Steven W. Strahler, *Primordial star formation: the role of molecular hydrogen*, The Astrophysical Journal, **271**:632-641, (August 1983)

[Paczynski78] B. Paczyński, *A model of selfgravitating accretion disk*, Acta Astronomica, Vol. 28.2, (1978)

[Press95] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannary, *Numerical recipes in C*, 2. Auflage (Cambridge University Press, 1995)

[Pringle81] J.E. Pringle, *Accretion discs in astrophysics*, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 19:137-62 (1981)

[Puy93] D. Puy, G. Alecian, J. Le Bourlot, J. Léorat and G. Pineau des Forêts, *Formation of primordial molecules and thermal balance in the early Universe*, Astron. Astrophys. 267, 337-346, (1993)

[Semenov03] D. Semenov, Th. Henning, CH. Helling, M. Ilgner and E. Sedlmayr, *Rosseland and Planck mean opacities for protoplanetary discs*, Astronomy and Astrophysics, 410:611-621, (August 2003)

[Stancil96] P.C. Stancil, S. Lepp and A. Dalgarno, *The lithium chemistry of the early Universe*, The Astrophysical Journal, 485:401-406, (February 1996)

[Stancil98] P.C. Stancil, S. Lepp and A. Dalgarno, *The deuterium chemistry of the early Universe*, The Astrophysical Journal, 509:1-10, (December 1998)

[Stoer00] Stoer-Bulirsch, *Einführung in die Numerische Mathematik II*, 4. Auflage (Springer, Berlin, 2000)

Erklärung:

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den 02.09.2004