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

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Michael Wehrstedt
aus Waldeck am Edersee

Tag der mündlichen Prüfung: 17. Dezember 2003

2-dimensionaler Stofftransport in protoplanetaren Akkretionsscheiben

Gutachter: Prof. Dr. Hans-Peter Gail
Prof. Dr. Max Camenzind

Zusammenfassung Kristalline Silikate und Kohlenwasserstoffe in Kometen sowie deuterierte Verbindungen in unterschiedlichen Körpern des Sonnensystems deuten auf ausgeprägte radiale Mischungsvorgänge im solaren Nebel, d.h. der protoplanetaren Akkretionsscheibe des Sonnensystems, hin. Für die Berechnung des radialen Stofftransports in protoplanetaren Scheiben ist es wichtig, die Scheibe vertikal aufzulösen, da Stoffe über die vertikale Richtung radial nach außen gemischt werden können. Im Rahmen dieser Arbeit werden numerische Modellrechnungen von protoplanetaren Akkretionsscheiben durchgeführt, in denen sowohl der radiale als auch der vertikale Stofftransport berücksichtigt ist. Dazu wird ein Satz von 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichungen für unterschiedliche Tracer selbstkonsistent mit dem System von Gleichungen für den Scheibenaufbau in der 1+1-dimensionalen Näherung gelöst. Die globale Flußstruktur der Scheibe ist gegeben durch das meridionale Geschwindigkeitsfeld, welches durch einen analytischen Ausdruck approximiert wird. Dieses wurde für Scheiben erstmals von Urpin (1984) abgeleitet und weist eine Einwärtsdrift in höheren Lagen und eine Auswärtsdrift nahe der Mittelebene in den meisten Regionen der Scheibe auf. Der turbulente Diffusionskoeffizient ist durch den β-Ansatz der Viskosität beschrieben. Die vertikale Selbstgravitation der Scheibe ist im Modell berücksichtigt. Tracer im Modell sind Silikat-Teilchen (Forsterit, Enstatit), die in den warmen inneren Bereichen der Scheibe kristallisieren, und Kohlenstoff-Staubteilchen, welche durch Oberflächenreaktionen mit OH-Molekülen verbrennen. Die Ergebnisse zeigen, daß beträchtliche Mengen an kristallisierten Silikaten sowie Methan als eines der Produkte der Kohlenstoffverbrennung bis in jene Regionen transportiert werden, in denen die Kometen fern ab von der Protosonne entstanden sind. Der 2-dimensionale Stofftransport im solaren Nebel bietet damit eine mögliche Erklärung für das kristalline Silikat und das Methan in den Kometen.

Abstract Crystalline silicates and aliphatic hydrocarbons in comets as well as deuterated species in several solar system bodies indicate an extensive radial mixing in the primordial solar nebula, i.e. the protoplanetary accretion disk of our solar system. To study the radial transport of matter within protoplanetary disks it is essential to resolve the vertical direction since matter is mixed radially outward by the complex 2-dimensional flow of the disk. In this work I perform numerical models of protoplanetary accretion disks with radial and vertical mixing by solving a set of 2-dimensional transport-reaction equations for different tracers self-consistently together with the set of disk equations in the 1+1-dimensional approximation. The global velocity field of the disk is given by an analytical approximation of the meridional flow pattern. The meridional flow pattern in disks which was first deduced by Urpin (1984) exhibits an inward drift in the upper layers and an outward drift in the midplane in most parts of the disk. The turbulent diffusity is expressed by the β-prescription of the viscosity. The vertical self-gravity of the disk is included within the model. Tracers are silicate grains (forsterit, enstatit) which anneal in the warm inner parts of the disk and carbonaceous grains which combust by surface reactions with OH molecules. Considerable fractions of crystallized silicates and methan as a product of carbon combustion are transported to the site of comet formation afar from the protosun. The 2-dimensional transport of tracers in the solar nebula therefore offers an explanation for the crystalline silicates and methan in the comets.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Akkretionsscheiben sind scheibenartige Gebilde aus Gas und Staub, die in den unterschiedlichsten Umgebungen im Kosmos anzutreffen sind. Als Beispiele seien hier die Akkretionsscheiben in den Zentren der Galaxien, in engen Doppelsternsystemen und um die jungen T Tauri-Sterne genannt. Letztere werden protoplanetare Akkretionsscheiben genannt, weil man annimmt, daß in diesen momentan Planeten gebildet werden. Die protoplanetaren Akkretionsscheiben sind das Thema dieser Arbeit.

1.1 Bildung der protoplanetaren Akkretionsscheibe

Es wird allgemein davon ausgegangen, daß Sterne durch den gravitativen Kollaps von verdichteten Kernen in Molekülwolken entstehen. Dabei führen die Turbulenz sowie die allgemeine Rotation der Molekülwolke dazu, daß der Wolkenkern einen eigenen Drehimpuls erhält. Beim Kollaps des Wolkenkerns trifft aus diesem Grund die einfallende Materie nicht gänzlich zentral auf den Protostern, sondern sie fällt auf Keplerbahnen um die neu entstandene Sonne. Dies geschieht aus allen denkbaren Richtungen, so daß gegenläufiges Material aufeinander prallt und abrupt abgebremst wird. Es sammelt sich in einem scheibenförmigen Gebilde um den Protostern, der protoplanetaren Akkretionsscheibe.

Die Einfallsgeschwindigkeit beim Kollaps beträgt typischerweise einige $10\,\mathrm{km\,s^{-1}}$ (z.B. Morfill et al. 1985). Die vertikalen Bewegungen in der protoplanetaren Scheibe sind jedoch um viele Größenordnungen langsamer. Die einfallende Materie wird somit in einer Stoßfront auf Unterschall-Geschwindigkeit abgebremst. Diese bildet gewissermaßen eine Hülle um die Akkretionsscheibe, während weiterhin Materie aus der umgebenden Molekülwolke auf die Scheibe einfällt.

Die Akkretionsscheibe ist in ihrer Ausdehnung vergleichbar mit der des Sonnensystems ($\sim 100\,\mathrm{AU}$) und damit um ~ 2 Größenordnungen kleiner als der anfängliche verdichtete Kern in der Molekülwolke ($\sim 0.05\,\mathrm{pc} \approx 10\,000\,\mathrm{AU}$). Diese Größenunterschiede bergen ein gewisses Problem in sich: Im heutigen Sonnensystem sind $99.87\,\%$ der Masse im Zentralgestirn konzentriert, jedoch nur $0.54\,\%$ des Gesamtdrehimpulses. Eine ähnliche Situation liegt in den extrasolaren Planetensystemen vor, von denen mittlerweile über 100 entdeckt wurden.[1] Es muß folglich ein Mechanismus in protoplanetaren Scheiben existieren, der

[1] Siehe z.B. die Liste von J. Schneider der bis dato entdeckten extrasolaren Planeten: `http://www.obspm.fr/encycl/catalog.html`.

gleichzeitig die Masse nach innen und den Drehimpuls sehr effizient nach außen transportiert. Nach derzeitiger Vorstellung wird der Massen- und Drehimpulstransport in Scheiben durch Turbulenz verursacht. Der Massenfluß auf das Zentralobjekt hat den Akkretionsscheiben auch ihren Namen gegeben (lateinisch: *accretio* = Zunahme).

Die protoplanetare Scheibe ist in der Anfangsphase nach ihrer Bildung einem noch sehr großen Masseneinfall aus der umgebenden Molekülwolke ausgesetzt. Die Scheibe ist daher in ihrer frühen Entwicklungsphase relativ heiß und massereich. Dies erklärt wahrscheinlich die heftigen Ausbrüche, die in einer Klasse von jungen Sternen, den FU Orionis-Sternen, beobachtet werden. Diese werden auf eine thermische Instabilität in der Scheibe zurückgeführt (Hartmann & Kenyon 1996; Bell & Lin 1994; für eine alternative Erklärung siehe Herbig et al. 2003). Massereiche protoplanetare Scheiben dürften in ihrer frühen Entwicklungsphase außerdem gravitativ instabil sein (Boss 2000). Darüber hinaus ist die Ausbildung von Materiejets möglicherweise auf die früheste Entwicklungsphase der Scheibe bzw. des Sterns begrenzt.

1.2 Von der Akkretionsscheibe zur Bildung von Planeten

Im Laufe der Zeit ebbt der Materieeinfall aus der Molekülwolke auf die protoplanetare Scheibe ab. Die Akkretionsscheibe tritt dann in eine eher ruhige, kontinuierliche Entwicklungsphase ein. Diese ist vom auswärts gerichteten Drehimpulstransport und von der langsamen Akkretion der Scheibenmaterie durch den Protostern bestimmt. Durch den Staub, der etwa $1\,\%$ der Gesamtmasse der Scheibe ausmacht, bleibt die Scheibe optisch dick. Während dieses Entwicklungsabschnitts setzt nach gängiger Vorstellung der Prozeß der Planetenbildung ein.

In der ersten Phase dieses Prozesses bleiben die ursprünglich $\mu\mathrm{m}$-großen Staubteilchen durch gegenseitige, zufällige Stöße im turbulenten Trägergas aneinander haften. Dies ist der Prozeß der Koagulation. Dieser sorgt dafür, daß die Staubteilchen zu Körpern von km-Größe wachsen.

Die km-großen Körper werden Planetesimale genannt. Sie besitzen ausreichend Masse, um durch ihre Gravitationswirkung kleinere Körper aufzusammeln. Auf diese Weise bildet sich ein Ensemble von ungefähr mondgroßen Protoplaneten. Dies ist die zweite Phase des Planetenbildungs-Prozesses.

In der dritten Phase der Planetenbildung entstehen aus den Protoplaneten große Gesteinskerne. Wachsen die Gesteinskerne bis über ~ 10 Erdmassen an, so reicht deren Gravitation aus, um Gas zu akkretieren. Es bilden sich die Gasplaneten mit ihren zum Teil mächtigen Gashüllen.

Massereiche Gesteinskerne können sich nur im mittleren und äußeren Scheibenbereich bilden. Im inneren Scheibenbereich (Abstand zur Sonne $\lesssim 4\,\mathrm{AU}$) steht nicht ausreichend Masse für die Bildung von Gesteinskernen mit ~ 10 Erdmassen zur Verfügung. Die Gesteinskerne im inneren Scheibenbereich können folglich keine großen Gasplaneten bilden.[2] Aus diesen entstehen in der vierten und letzten Phase der Planetenbildung die terrestrischen Planeten.

[2]Dies liegt auch daran, daß im inneren Scheibenbereich die Hill-Sphäre der Gesteinskerne weniger ausgedehnt ist als im äußeren Scheibenbereich.

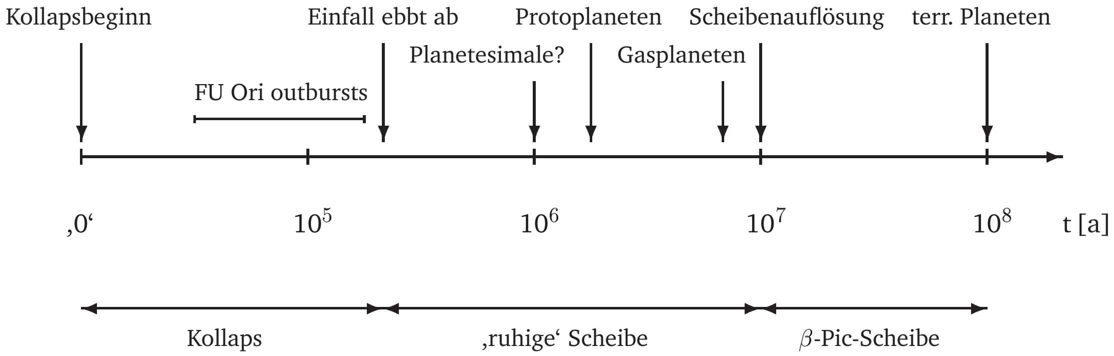


Abbildung 1.2.1: Zeitabfolge der Entstehung des Planetensystems. Man beachte die willkürliche Wahl des Zeit-Nullpunktes für die logarithmische Skala.

Die Zeitskala, innerhalb der sich aus den vorhandenen Protoplaneten die planetengroßen terrestrischen Körper bilden können, ist dabei länger als die typische Lebensdauer von protoplanetaren Scheiben. Die protoplanetaren Scheiben existieren für maximal etwa 10^7 Jahre (Haisch et al. 2001). Dann hat der stetige Wind des T Tauri-Sterns das Gas der Scheibe vollständig verdrängt (Shu et al. 1993). Nahe gelegenene O- und B-Sterne vermögen den Auflösungsprozeß der Scheibe durch ihre UV-Strahlung zu beschleunigen (Matsuyama et al. 2003). Es verbleibt dann eine Scheibe, bei der die Zwischenräume der Planeten noch stark vom Trümmerschutt der Planetenbildung gefüllt sind. Die Scheibe wird aber nach und nach von diesem Trümmerschutt entleert, indem dieser entweder auf die großen Körper stürzt (Sonne, Planeten) oder auf ungebundene bzw. zumindest stark elliptische Bahnen um die Protosonne gezwungen wird. Die Körper mit stark elliptischen Bahnen bilden die Oortsche Wolke im äußeren Sonnensystem. Die Sonne hat derweil die Hauptreihe im Hertzsprung-Russell Diagramm erreicht und ist dann ein voll ausgebildeter, wasserstoffbrennender Stern.

Damit ist die Bildung des Sonnensystems abgeschlossen. Die ungefähre Zeitabfolge der Abläufe, die nach derzeitiger Vorstellung beim Bildungsprozeß des Sonnensystems involviert sind, ist in Abb. 1.2.1 dargestellt. Zusätzlich veranschaulicht Abb. 1.2.2 die Vorgänge, die innerhalb der protoplanetaren Akkretionsscheibe während ihrer ruhigen Entwicklungsphase vermutet werden.

1.3 Transportvorgänge in der protoplanetaren Scheibe

Die Asteroiden und Kometen entstehen im solaren Nebel als Nebenprodukte der Planetenbildung. Die Asteroiden befinden sich vorwiegend in Bahnen zwischen Mars und Jupiter, wo ein vollständiger Planet offenbar aufgrund der Schwerkraft Jupiters nicht gebildet werden konnte. Die Kometen sind Planetesimale, die in den kühlen Außenzonen des solaren Nebels entstanden sind, wo Eise aus der Gasphase kondensieren konnten.

Für die Erforschung der Vorgänge im solaren Nebel bieten die Kometen die besten Voraussetzungen. Die Materie der Kometenkerne ist seit ihrer Bildung im solaren Nebel nicht prozessiert worden (abgesehen von wenigen nahen Sonnenpassagen). Damit enthalten die Kometen einen Teil der unveränderten Urmaterie des Sonnensystems. Im Gegensatz

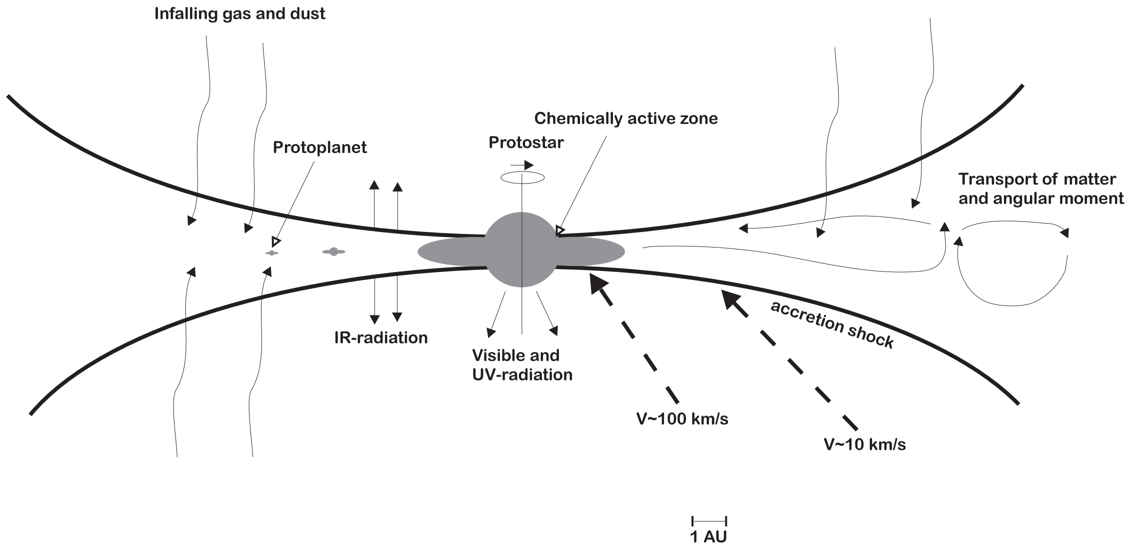


Abbildung 1.2.2: Vorgänge in der protoplanetaren Akkretionsscheibe in der Entwicklungsphase, in der der Masseneinfall bereits stark abgenommen hat (nach van Dishoeck 1993).

dazu wurden die Asteroiden überwiegend aufgeschmolzen, so daß ein großer Teil der Information über deren Urzustand verloren ging.

Interessanterweise zeigen die Spektren einiger Kometen, z.B. der Kometen Halley und Hale-Bopp, daß bis zu $\sim 20\,\%$ ihres Silikatanteils in kristalliner Form vorliegt (z.B. Hanner et al. 1994b). Nach heutiger Vorstellung ist der Silikatstaub im interstallaren Medium (ISM) aber praktisch vollständig amorph. Folglich gelangte der Silikatstaub in dieser Form in die protoplanetare Scheibe. Es erhebt sich daher die Frage, woher das kristalline Silikat in den Kometen stammt. Die Geburtsstätte der Kometen im Außenbereich der Scheibe war zu kühl, um das amorphe Silikat zu kristallisieren. Es wird daher vermutet, daß die Silikate zunächst in den warmen inneren Scheibenregionen kristallisierten und sodann durch großräumige radiale Transportvorgänge in die äußeren Scheibenbereiche gelangt sind, wo sie schließlich in die Kometen eingebaut werden konnten.

Auch die Herkunft des Methans in den Kometen läßt sich mit Hilfe von radialen Transportprozessen in der protoplanetaren Scheibe des jungen Sonnensystems erklären (z.B. Crovisier & Bockel'ee-Morvan 1999). Methan wie auch andere kettenförmige Kohlenwasserstoffe können im äußeren Scheibenbereich nicht entstehen, da dort die chemischen Reaktionen für deren Bildung viel zu langsam ablaufen. Außerdem dürfte Methan im ISM nicht in solchen Mengen vorliegen, die für die Kometen ausreichend wären. Das Methan in den Kometen könnte jedoch im warmen Innenbereich der Scheibe in größeren Mengen gebildet worden sein und anschließend durch radiale Transportvorgänge zur Geburtsstätte der Kometen gelangt sein.

Radiale Transportvorgänge im protoplanetaren Nebel bieten folglich eine mögliche Erklärung für die Zusammensetzung der ursprünglichsten Körper des Sonnensystems. Darüber hinaus sprechen die Deuterium-Häufigkeiten in den Gasplaneten sowie den Kometen ebenfalls für großräumige Transportvorgänge im solaren Nebel (Drouart et al. 1999).

Es wird davon ausgegangen, daß zum einen die Turbulenz in der protoplanetaren Scheibe für eine diffusive Ausbreitung von Stoffen in der Scheibe sorgt. Zum anderen existieren advektive Bewegungen im Scheibengas. Der Akkretionsprozeß z.B. führt in den inneren Scheibenbereichen zu einer einwärts gerichteten Massenverlagerung (z.B. Lynden-Bell & Pringle 1974). Allerdings ist das Strömungsfeld in der Scheibe nicht einfach einwärts gerichtet, sondern offenbar wesentlich komplexer. Es liegt wahrscheinlich ein meridionales Strömungsfeld vor, welches in größerer Höhe über der Scheiben-Mittelebene einwärts gerichtet, nahe der Scheiben-Mittelebene jedoch auswärts gerichtet ist (Urpin 1984).[3] Das meridionale Strömungsfeld sorgt gemeinsam mit der turbulenten Diffusion für den räumlichen Transport von Stoffen in der Scheibe.

Die Idee des räumlichen Stofftransports in der protoplanetaren Scheibe ist Morfill (1983) zuzuschreiben. Demnach wird der Stofftransport in der Scheibe durch die sogenannte Transport-Reaktions-Gleichung beschrieben. Diese enthält Terme für den diffusiven und den advektiven Stofftransport sowie die Ratenterme für die Bildung und die Zerstörung von Stoffen. Der Arbeit von Morfill (1983) folgten vereinfachte analytische Modelle des Stofftransports in der Scheibe (z.B. Morfill & Völk 1984; Stevenson 1990). Stevenson & Lunine (1988) lösten erstmals die Transport-Reaktions-Gleichung auf numerischem Wege. Die Autoren berechneten den Transport von Wasserdampf im solaren Nebel, jedoch mit einem vereinfachten Scheibenmodell. Ebenso verwendeten Cyr et al. (1998) sowie Drouart et al. (1999) und Hersant et al. (2001) vereinfachte Scheibenstrukturen, um den Transport von Wasserdampf bzw. von deuterierten Verbindungen im solaren Nebel zu berechnen. Bockelée-Morvan et al. (2002) lösten die Transport-Reaktions-Gleichung, um das Ausmaß des Transports von kristallinem Silikat in der solaren Akkretionsscheibe zu ermitteln.

In einer Serie von Veröffentlichungen löste Gail mit weiteren Autoren die Transport-Reaktions-Gleichung simultan mit einem realistischeren Modell für die Scheibenstruktur. Dabei wurde zum ersten Mal die Rückwirkung des Stofftransports auf die Scheibenstruktur berücksichtigt. Die Serie behandelt den Transport von kristallisiertem Silikat und den Produkten der Kohlenstoffverbrennung sowohl in stationären Scheibenmodellen (Gail 2001; Gail 2002; Gail 2003) als auch in zeitabhängigen Modellen der solaren Akkretionsscheibe (Wehrstedt & Gail 2002) sowie in Akkretionsscheiben mit unterschiedlicher Metallizität (Wehrstedt & Gail 2003).

Alle bisher genannten Arbeiten berücksichtigten den Stofftransport lediglich in der radialen Raumrichtung. Keller (2003) führte dagegen Scheibensimulationen durch, bei denen erstmalig der 2-dimensionale Stofftransport (radial und vertikal) mit dem realistischen meridionalen Strömungsfeld berechnet worden ist (siehe auch Keller & Gail 2004). Die zugrunde liegende Scheibenstruktur war dabei allerdings stark vereinfacht.

1.4 Inhalt und Gliederung der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit wird der zeitabhängige 2-dimensionale Stofftransport in protoplanetaren Akkretionsscheiben modelliert. Die Scheibenstruktur (Temperatur, Dichte etc.) wird dabei durch ein 1+1-dimensionales Modell erstmals simultan mit dem 2-dimensionalen Stofftransport berechnet.

[3] Dem meridionalen Strömungsfeld sind womöglich zyklonartige Wirbel überlagert, die in den 3-dimensionalen numerischen Simulationen von Klahr & Bodenheimer (2003) nachgewiesen worden sind.

Ziel der Arbeit ist es, das Ausmaß des radialen Stofftransports in protoplanetaren Scheiben und dessen Auswirkung auf die Zusammensetzung der ursprünglichsten Körper des Sonnensystems zu bestimmen.

In Kapitel 2 wird das zeitabhängige radiale Scheibenmodell vorgestellt. Dies umfaßt auch die Berechnung der Kondensation der wichtigsten Staubsorten in der Scheibe. Überdies wird besonderer Wert auf eine realistische Bestimmung der Opazität der Scheibenmaterie gelegt. In Kapitel 3 wird die vertikale Scheibenstruktur berechnet. Damit ist die 1+1-dimensionale Struktur der protoplanetaren Scheibe vorgegeben. Darauf basierend wird in Kapitel 4 der 2-dimensionale Stofftransport durch die Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung berechnet. Die Stoffe, deren Transport modelliert wird, sind Silikate, die im warmen inneren Scheibenbereich kristallisieren, und Kohlenstoffstaub, der in der innersten Scheibenzone verbrennt. Es werden die Ergebnisse von Modellen mit und ohne meridionalem Strömungsfeld vorgestellt. In Kapitel 5 werden die Ergebnisse zusammengefaßt und ein Ausblick gegeben.

Kapitel 2

Das radiale Scheibenmodell

Es sollen im Folgenden die Grundgleichungen zur Beschreibung der Struktur und zeitlichen Entwicklung der protoplanetaren Akkretionsscheibe in einer Raum-Dimension abgeleitet werden. Dafür werden Zylinderkoordinaten (r, ϕ, z) verwendet.

2.1 Grundlagen

2.1.1 Einzonennäherung

Es wird, wie in der Einleitung dargestellt, von einem scheibenförmigen Gebilde ausgegangen, das um die junge, noch im Entstehen begriffene Sonne rotiert.

Symmetrie Die Scheibe soll axialsymmetrisch zur Rotationsachse sein. Dies ist eine realistische Annahme, solange zum einen die Masse der Scheibe nicht so groß ist, daß die Scheibe gravitativ instabil wird, und zum anderen sich nicht bereits ein großer planetenförmiger Körper in der Scheibe gebildet hat. In beiden Fällen kommt es zur Ausbildung nicht-axialsymmetrischer Dichtestörungen (Spiralarme), wie z.B. durch Boss (1996) im Falle von gravitativer Instabilität der Scheibe und durch Bryden et al. (2000) im Falle eines Protoplaneten in der Scheibe durch numerische Rechnungen belegt wurde. In der vorliegenden Arbeit soll die Entwicklung der protoplanetaren Scheibe in ihrer ‚ruhigen' Phase behandelt werden. Dies ist die Entwicklungsphase nach dem frühesten Entwicklungsstadium, in dem die Scheibe noch massereich war und einen Großteil ihrer Masse durch Akkretion an den Protostern verlor, und vor dem späteren Entwicklungstadium der Bildung erster planetarer Körper. In dieser Entwicklungsphase kann daher die Scheibe in guter Näherung als axialsymmetrisch angenommen werden.
Einzige äußere Krafteinwirkung auf die Scheibe soll die Gravitationswirkung des Zentralsterns bei $(r = 0, z = 0)$ sein. Die Scheibe ist demzufolge symmetrisch zu ihrer Mittelebene $z = 0$. Die Berücksichtigung der Selbstgravitation der Scheibe (siehe Abschnitt 2.2.3) ändert nichts an den Symmetrieeigenschaften der Scheibe.

Vertikale Mittelung Die Scheibe soll geometrisch dünn sein, d.h. die vertikale Ausdehnung der Scheibe soll wesentlich geringer als ihre radiale Ausdehnung sein. Alle physikalischen Größen werden in vertikaler Richtung gemittelt. Dies ist die sog. *Einzonennäherung*, bei der alle physikalischen Größen allein in Abhängigkeit des radialen Abstands r

vom Zentralstern betrachtet werden. In der Einzonennäherung wird somit die Struktur der Scheibe in bzw. nahe ihrer Mittelebene bestimmt.

Definition der Flächendichte Mittels der Massendichte der Scheibenmaterie $\rho(r,z)$ berechnet man am Ort r auf folgende Weise die Säulen- oder Flächendichte:

$$\Sigma(r) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(r,z)\, dz = 2\int_{0}^{\infty} \rho(r,z)\, dz \ . \tag{2.1.1}$$

Die zweite Identität folgt aus der Symmetrie der Scheibe um die Mittelebene.

2.1.2 Erhaltungsgleichungen

Massenerhaltung Es wird ein dünner Zylinderring in der Scheibe in der Distanz r zum Stern und der Breite Δr betrachtet. Die Masse, die im Zylinderring vorhanden ist, beträgt $2\pi r \Delta r \Sigma(r,t)$. Die Änderung der Masse im Zylinderring ist gegeben durch den Zufluß durch den einen Rand und den Abfluß durch den anderen Rand, also

$$\frac{\partial}{\partial t} 2\pi\Delta r \Sigma(r,t) = 2\pi r \Sigma(r,t) v_r(r,t) - 2\pi(r+\Delta r)\Sigma(r+\Delta r,t) v_r(r+\Delta r,t) \ , \tag{2.1.2}$$

Hier ist v_r die Geschwindigkeit der Scheibenmaterie in radialer Richtung. Führt man den Grenzübergang $\Delta r \to 0$ durch, so erhält man die Gleichung für die Massenerhaltung in der Scheibe

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r v_r \Sigma = 0 \ . \tag{2.1.3}$$

Dies ist die Kontinuitätsgleichung unter Vernachlässigung des Masseneinfalls auf die Scheibe und des Massenverlusts aus der Scheibe.

Drehimpulserhaltung Ähnlich wie die Gleichung der Massenerhaltung (2.1.3) läßt sich auch die Gleichung für die Drehimpulserhaltung in der Scheibe ableiten. Man erhält

$$\frac{\partial}{\partial t} \Sigma\, r v_\phi + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r v_r \Sigma\, r v_\phi = \mathcal{L}(r,t) \ . \tag{2.1.4}$$

Hier ist v_ϕ die azimutale Geschwindigkeit der Scheibenmaterie, und $\mathcal{L}$ stellt ein zusätzlich einwirkendes Drehmoment auf die Scheibenmaterie dar. Dieses muß hier eingeführt werden, da die Scheibe differentiell rotiert – bei Keplerscher Rotation außen langsamer als innen – und somit mittels turbulenter Reibung Drehimpuls zwischen benachbarten Zylinderringen ausgetauscht werden kann. Anschaulich bewirkt der turbulente Austausch zweier Gaspakete gleicher Masse zwischen $r-\Delta r$ und $r+\Delta r$, daß das nach innen transportierte Gaspaket einen kleineren, das nach außen transportierte Gaspaket einen größeren Drehimpuls als ein vergleichbares Gaspaket in seiner neuen Umgebung besitzt. Für das resultierende Drehmoment ergibt sich (Pringle 1981; Frank et al. 1992)

$$\mathcal{L}(r,t) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r^3 \nu \Sigma \frac{\partial}{\partial r}\frac{v_\phi}{r} \ , \tag{2.1.5}$$

wobei ν die (turbulente) Viskosität der Scheibenmaterie ist.

Die Herleitung der Gleichungen für die Massenerhaltung (2.1.3) und die Drehimpulserhaltung (2.1.4) in der Einzonennäherung kann daher auch allgemein über die Navier-Stokes-Gleichungen der Hydrodynamik erfolgen. Es wurde jedoch hier ein anschaulicherer Weg der Herleitung gewählt (vergl. auch Frank et al. 1992) und so eine umfangreiche Einführung in die Tensor-Algebra vermieden.

2.2 Die radialen Aufbaugleichungen der Scheibe

2.2.1 Zeitliche Entwicklung der Scheibe

Unter Verwendung der obigen Erhaltungsgleichungen der Masse (2.1.3) und des Drehimpulses (2.1.4) und (2.1.5) läßt sich nun eine Gleichung für die zeitliche Entwicklung der Flächendichte Σ ableiten. Mit der Annahme, daß die Azimutalgeschwindigkeit v_ϕ zeitunabhängig ist, erhält man

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{(rv_\phi)'}\frac{\partial}{\partial r}\, r^3 \nu \Sigma \left(\frac{v_\phi}{r}\right)' \ , \tag{2.2.1}$$

wobei das Apostroph ($'$) für die Ableitung nach r steht. Für die Bewegung des Scheibengases im Gravitationspotential des Zentralsterns gilt in guter Näherung ein Kräftegleichgewicht zwischen Gravitationsanziehung und Fliehkraft. Die Kraftwirkung durch den radialen Druckgradienten auf das Gas ist in protoplanetaren Scheiben i. A. gegenüber der Gravitations- bzw. der Fliehkraft zu vernachlässigen. Das Gas rotiert folglich auf Keplerschen Kreisbahnen mit der Umlaufgeschwindigkeit

$$v_\phi = r\Omega = \sqrt{\frac{GM_*}{r}} \ , \tag{2.2.2}$$

wobei G die Gravitationskonstante, M_* die Masse des Sterns und Ω die Winkelgeschwindigkeit ist. Scheiben, die ein Rotationsprofil gemäß (2.2.2) aufweisen, nennt man *Keplersch*. Gleichung (2.2.2) eingesetzt in (2.2.1) ergibt schließlich

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = \frac{3}{r}\frac{\partial}{\partial r}\sqrt{r}\frac{\partial}{\partial r}\nu\Sigma\sqrt{r} \ . \tag{2.2.3}$$

Gleichung (2.2.3) stellt eine parabolische Differentialgleichung dar. Die zeitliche Entwicklung der Flächendichte wird also durch einen diffusionsartigen Prozeß beschrieben.

Bei Berücksichtigung des äußeren Masseneinfalls auf die Scheibe ergibt sich in Glg. (2.2.3) ein zusätzlicher additiver Term (vergl. z.B. Nakamoto & Nakagawa 1994). Da jedoch angenommen wird, daß die Scheibe sich in der ‚ruhigen' Phase ihrer Entwicklung befindet, wird dieser Term im Rahmen des Modells vernachlässigt.

Massenakkretionsrate Die diffusionsartige zeitliche Entwicklung der Flächendichte versucht jeden radialen Gradienten der Flächendichte auszugleichen. Die Masse, die am Ort r pro Zeiteinheit radial in der Scheibe transportiert wird, ist gegeben durch

$$\dot{M}(r,t) = 2\pi r \Sigma(r,t)\, v_r(r,t) \ . \tag{2.2.4}$$

$\dot{M}$ wird als Massenakkretionsrate bezeichnet.

Radiale Driftgeschwindigkeit Durch Einsetzen von Glg. (2.2.3) in die Kontinuitätsgleichung (2.1.3) erhält man für die radiale Transport- oder Driftgeschwindigkeit der Scheibenmaterie

$$v_r(r,t) = -\frac{3}{\sqrt{r}\Sigma(r,t)} \frac{\partial}{\partial r} \nu\Sigma(r,t)\sqrt{r} \ . \tag{2.2.5}$$

Genauer gesagt ist die radiale Drift eine der Azimutalbewegung überlagerte Bewegung. Die Scheibenmaterie umläuft den Zentralstern auf Spiralbahnen. Der Betrag und das Vorzeichen von v_r wird wesentlich vom radialen Verlauf der Viskosität ν bestimmt. Wie in Abschnitt 2.2.2 gezeigt wird, ist die radiale Drift der Scheibenmaterie in protoplanetaren Scheiben tatsächlich ein sehr langsamer Prozeß. In erster Näherung bewegt sich die Materie auf Kreisbahnen um den Stern.

Massenakkretion des Sterns Aufgrund des radialen Massentransports in der Scheibe fällt Materie vom Innenrand der Scheibe auf den Stern. Die Masse des Sterns ist daher gegeben durch

$$M_*(t) = M_*(0) - \int_0^t \dot{M}(r_{\rm in}, t')\, dt' \ , \tag{2.2.6}$$

wobei $r_{\rm in}$ der innere Rand der Scheibe ist. Das Wachstum der Sternmasse ist ebenfalls ein langsamer Prozeß. Man beachte, daß $\dot{M}$ bei $r_{\rm in}$ negativ ist.

Scheibenmasse Die Masse der Scheibe ist gegeben durch

$$M_{\rm disk}(t) = \int_{r_{\rm in}}^{r_{\rm out}} 2\pi r\Sigma(r,t)\, dr \ , \tag{2.2.7}$$

wobei $r_{\rm out}$ der äußere Rand der Scheibe ist. Die Scheibenmasse nimmt infolge der Massenakkretion auf den Stern mit der Zeit ab.

Scheibendrehimpuls Der Drehimpuls der Scheibe berechnet sich aus

$$J_{\rm disk} = \int_{r_{\rm in}}^{r_{\rm out}} 2\pi r^3 \Omega\, \Sigma\, dr \ . \tag{2.2.8}$$

Stationäre Lösung Im stationären Fall, d.h. wenn $\frac{\partial\Sigma}{\partial t} = 0$ in Glg. (2.2.3) gesetzt wird, läßt sich der radiale Verlauf der Flächendichte explizit angeben. Unter der Bedingung, daß am Innenrand der Scheibe die Materie von Keplerscher Umlaufgeschwindigkeit auf die wesentlich kleinere Rotationsgeschwindigkeit des Sterns abgebremst wird, erhält man (z.B. Pringle 1981; Frank et al. 1992)

$$\nu\Sigma = \frac{|\dot{M}|}{3\pi}\left[1 - \sqrt{\frac{R_*}{r}}\right] \ , \tag{2.2.9}$$

wobei R_* der Radius des Sterns ist. Für die Berechnung von Σ im stationären Fall muß folglich die Massenakkretionsrate $\dot{M}$ in der Scheibe vorgegeben werden.

2.2.2 Viskosität

Die Gleichung für die Flächendichte (2.2.3) zeigt, daß die Viskosität ν wesentlich die zeitliche Entwicklung der Akkretionsscheibe bestimmt. Über die Viskosität der Scheibenmaterie ist bislang jedoch nur wenig bekannt.

Sicher scheint, daß die *molekulare* Viskosität die Eigenschaften von protoplanetaren Scheiben nicht erklären kann. Vielmehr muß eine *turbulente* Reibung angenommen werden. Im wesentlichen gibt es hierfür zwei Gründe:

- **Die beträchtlichen Massenakkretionsraten in T Tauri-Systemen.** Aus der Äquivalentsbreite der Ionisationslinien des Wasserstoffs ($H\alpha$, $H\beta$) und anderer Elemente in T Tauri-Sternen leitet man Massenakkretionsraten in der Größenordnung von $10^{-7\cdots-9}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ab (z.B. Hartmann 2000). In einer Scheibe mit molekularer Viskosität existiert jedoch so gut wie kein radialer Massenfluß, da die Viskosität so gering ist, daß die Scheibenmaterie den Protostern in annähernd perfekten Kreisbahnen umläuft. Im Gegensatz dazu besitzen turbulente Strömungen ausreichend große Viskosität, um einen radialen Massenfluß hervorzurufen, der die beobachteten Massenakkretionsraten wiedergeben kann.
- **Der Drehimpulstransport im solaren Nebel.** Die Sonne vereint in sich den größten Teil der Gesamtmasse des Sonnensystems, während sich der überwiegende Teil des Drehimpulses in den Planeten befindet. Eine Erklärung hierfür bietet die Existenz von Turbulenz im solaren Nebel, durch welche die Masse radial nach innen, der Drehimpuls in der Scheibe aber radial nach außen transportiert werden kann. Eine Scheibe mit molekularer Viskosität stellt hingegen eine laminare Strömung dar, in der das Ausmaß des Drehimpuls-Transports wesentlich geringer als in einer turbulenten Scheibe ist.

Es wird im Folgenden also eine ausgeprägte Turbulenz, d.h. eine turbulente Viskosität, in den Scheiben angenommen.

Welcher Prozeß allerdings für die Turbulenz in Scheiben verantwortlich ist, ist bis dato umstritten. Vorschläge gibt es viele: Scherung durch differentielle Rotation (z.B. Chagelishvili et al. 2003 und Referenzen darin), Konvektion durch den vertikalen Temperaturgradienten (z.B. Kley et al. 1993), barokline Instabilität (Cabot 1984; Klahr & Bodenheimer 2003) und magnetohydrodynamische (MHD) Instabilität (Balbus & Hawley 1991) seien hier als wichtigste Vertreter genannt. Doch diese Lösungsansätze vermögen es bislang nicht, die Ursache der Turbulenz in den Scheiben eindeutig festzustellen.

Beispielhaft soll im Folgenden die Diskussion über die magnetohydrodynamische Instabilität kritisch betrachtet werden. Diese lineare Instabilität wird bereits bei Anwesenheit eines schwachen vertikalen Magnetfeldes in der Scheibe in Gang gesetzt (Balbus & Hawley 1991). Damit die Scheibe allerdings von einem Magnetfeld durchsetzt ist, muß die Scheibenmaterie zu einem gewissen Maße elektrisch leitfähig sein. Da aber die stark opaken Scheiben weitgehend die ionisierende Strahlung des jungen Sterns und des interstellaren Mediums (ISM) abschirmen, dürfte die elektrische Leitfähigkeit zumindest in der Mittelebene der Scheibe nicht ausreichen, um die magnetohydrodynamische Instabilität zu aktivieren (Finocchi & Gail 1997). Die magnetohydrodynamische Instabilität scheint daher als Auslöser einer *globalen* Turbulenz in protoplanetaren Akkretionsscheiben nicht in Frage zu kommen. Sie dürfte jedoch in den thermisch ionisierten innersten

Teilen der protoplanetare Scheibe sowie in den teilweise ionisierten Schichten nahe der Scheiben-Oberfläche aktiviert werden. Die magnetohydrodynamische Instabilität ist dagegen möglicherweise für die globale Turbulenz in den Akkretionsscheiben in kataklysmischen Dopplerstern-Systemen und um die Schwarzen Löcher in galaktischen Kernen verantwortlich.

α-Viskosität Selbst mit Kenntnis der tatsächlichen Ursache der Turbulenz in protoplanetaren Scheiben wäre die numerische Modellierung derselben vor große Probleme gestellt. Die Auflösung der Turbulenz in hydrodynamischen Simulationen bis zu den kleinsten Skalen übersteigt bei weitem die Rechenkapazität selbst der derzeit leistungsfähigsten Computer. Aus diesem Grund wurden bereits früh Ansätze zur Parametrisierung der turbulenten Viskosität eingeführt, um die Auflösung der kleinsten Skalen zu umgehen. In der Scheibentheorie ist dies vor allem der sogenannte α-Ansatz für die Viskosität von Shakura & Sunyaev (1973),

$$\nu_\alpha = \alpha\, h_\mathrm{s} c_\mathrm{s}\ . \tag{2.2.10}$$

Hier ist h_s die Druckskalenhöhe der Scheibe, c_s die isotherme Schallgeschwindigkeit der Scheibenmaterie und α ein (unbekannter) Parameter mit $\alpha \leq 1$. Veranschaulicht sagt der α-Ansatz aus, daß ein turbulenter Wirbel in der Scheibe nicht größer als die vertikale Ausdehnung der Scheibe sein kann und daß die Geschwindigkeit der Materie im Wirbel niemals größer als die lokale Schallgeschwindigkeit ist, da ein Medium mit Überschall-Turbulenz durch Ausbildung von Stoßfronten unmittelbar auf Unterschall-Geschwindigkeit abgremst wird. Der Parameter α muß daher kleiner Eins gewählt werden.

Der α-Ansatz hatte besonders Erfolg bei der Beschreibung der Eigenschaften der Akkretionsscheiben in kataklysmischen Dopplersternen, wo α in der Größenordnung $10^{-1}\ldots 10^{0}$ gewählt wird. In protoplanetaren Scheiben leitet man aus der Beobachtung (Lebensdauer der Scheiben, Akkretionsrate) Werte für α von $\sim 10^{-3}\ldots 10^{-2}$ ab.

β-Viskosität Ein weiterer Ansatz zur Parametrisierung der Viskosität in Scheiben ist der β-Ansatz (Duschl et al. 2000; Huré et al. 2001):

$$\nu_\beta = \beta\, r v_\phi = \beta\, r^2 \Omega\ . \tag{2.2.11}$$

Beim β-Ansatz sind als turbulente Längen- und Geschwindigkeitsskalen der Radius r und die Umlaufgeschwindigkeit v_ϕ gewählt. Damit entspricht der Parameter β gerade dem Reziproken der kritischen Reynolds-Zahl $\Re_\mathrm{crit}$ aus der Turbulenztheorie. Für Reynolds-Zahlen $\Re > \Re_\mathrm{crit}$ ist eine Strömung nicht mehr stabil gegen Turbulenz.

Viskose Zeitskala Die viskose Zeitskala der Scheibe ist definiert als

$$\tau_\mathrm{vis} = \frac{r^2}{\nu}\ . \tag{2.2.12}$$

Sie ist ein Maß für die Zeit, in der sich die Scheibe hydrodynamisch entwickelt.

Abb. 2.2.1 zeigt den radialen Verlauf der viskosen Zeitskala der Scheibe für den α-Ansatz (Glg. (2.2.10)) bzw. den β-Ansatz (Glg. (2.2.11)), wobei $\alpha = 3{\cdot}10^{-3}$ bzw. $\beta = 10^{-5}$ für die Viskositätsparameter gewählt wurde. Die β-Viskosität wurde hierbei mit Hilfe der Winkelgeschwindigkeit (2.2.2) berechnet, wobei $\nu_\beta \propto r^{1/2}$ folgt. Für die α-Viskosität wurde ein

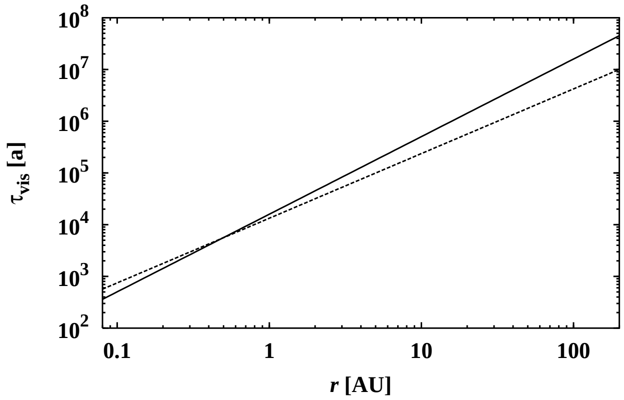


Abbildung 2.2.1: Viskose Zeitskala der Scheibe für den α-Ansatz der Viskosität (gestrichelte Linie) bzw. β-Ansatz der Viskosität (durchgezogene Linie) in Abhängigkeit des radialen Abstands r vom Stern in Astronomischen Einheiten (AU). Es wurden $\alpha = 3{\cdot}10^{-3}$ und $\beta = 10^{-5}$ gesetzt. Für Details siehe Text.

radiales Temperaturprofil der Form $T(r) = T_0(r/\mathrm{AU})^{-\lambda}$ angenommen, wobei $T_0 = 1000\,\mathrm{K}$ als Temperatur bei $1\,\mathrm{AU}$ und $\lambda = \frac{3}{4}$ gewählt wurden. Ein mit der Potenz $\lambda = \frac{3}{4}$ abfallendes radiales Temperaturprofil ergibt sich in Scheibenmodellen mit α-Viskosität genau dann, wenn die Scheibe im Rahmen der Einzonennäherung als stationär betrachtet und eine konstante vertikale optische Tiefe in der Scheibe angenommen wird. Setzt man nämlich $\frac{\partial\Sigma}{\partial t} = 0$ in Glg. (2.2.3), so folgt $\nu\Sigma = \mathrm{const}$, so daß bei konstanter optischer Tiefe nach Glgen. (2.2.22) und (2.2.26) $T^4 \propto \Omega^2$, also $T \propto r^{-3/4}$ folgt. Für die α-Viskosität ergibt sich unter diesen Voraussetzungen $\nu_\alpha \propto r^{3/4}$.

Mit den angegebenen Werten beträgt die viskose Zeitskala bei $1\,\mathrm{AU}$ etwa $10\,000$ Jahre und bei $10\,\mathrm{AU}$ – je nach Viskositäts-Ansatz – wenige bis einige $100\,000$ Jahre. Dies sind ebenfalls die Zeitskalen für die radiale Einwärtsdrift der Scheibenmaterie von den angegebenen radialen Entfernungen bis zum Scheibeninnenrand (vergl. Glg. (2.2.5)). Die radiale Drift samt des Massenzuwachs des Sterns durch Akkretion ist also tatsächlich ein langsamer Prozeß, und es gilt $v_r \ll v_\phi$.

2.2.3 Vertikale Druckschichtung

Hydrostatisches Gleichgewicht In der protoplanetaren Scheibe kann im Rahmen der Einzonennäherung der radiale Druckgradient gegenüber dem vertikalen Druckgradienten vernachlässigt werden, da die vertikale Ausdehnung der Scheibe viel kleiner als deren radiale Ausdehnung ist. Unter dieser Voraussetzung läßt sich die vertikale Scheibenstruktur als planparallele Atmosphäre beschreiben, die sich im hydrostatischen Gleichgewicht befindet. In Scheiben bedeutet hydrostatisches Gleichgewicht, daß die Beschleunigung aufgrund des vertikalen Druckgradienten gerade gleich der vertikalen Komponente der Gravitationsbeschleunigung des Sterns ist, d.h.

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial z} = -\Omega^2 z = -\frac{GM_*}{r^3}\,z\ , \tag{2.2.13}$$

wobei P der Druck ist. Die vertikale Änderung der Winkelgeschwindigkeit kann infolge der geringen vertikalen Ausdehnung der Scheibe vernachlässigt werden.

Es wird angenommen, daß das Gas der Scheibe ein ideales, verdünntes Gas darstellt. Für die Zustandsgleichung des Gases gilt also

$$P = c_\mathrm{s}^2\,\rho\ , \tag{2.2.14}$$

wobei die isotherme Schallgeschwindigkeit c_{s} durch

$$c_{\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu m_{\mathrm{H}}}} \tag{2.2.15}$$

gegeben ist. Hier ist k_{B} die Boltzmann-Konstante, T die Temperatur, μ das mittlere Molekulargewicht und m_{H} die Masse des Wasserstoffatoms.

Unter der vereinfachenden Annahme, daß die Schichtung vertikal isotherm, d.h. c_{s} konstant ist, läßt sich die Differentialgleichung (2.2.13) bei Verwendung von Glg. (2.2.14) lösen. Das Ergebnis ist

$$P(z) = P_{\mathrm{c}}\, e^{-z^2/2h_{\mathrm{s}}^2} \ . \tag{2.2.16}$$

Die vertikale Druckschichtung bei hydrostatischem Gleichgewicht entspricht folglich einem Gauß-Profil. P_{c} ist der Druck in der Scheiben-Mittelebene, und

$$h_{\mathrm{s}} = \frac{c_{\mathrm{s}}}{\Omega} \tag{2.2.17}$$

wird als Druckskalenhöhe bezeichnet. In der Höhe $z = h_{\mathrm{s}}$ oberhalb der Mittelebene der Scheibe ist der Druck gerade um den Faktor $e^{-1/2}$ des Zentraldrucks P_{c} abgefallen.[1]

Selbstgravitation der Scheibe In massereichen Scheiben kann die Selbstgravitation der Scheibe nicht gegenüber der Gravitation des Zentralobjekts vernachlässigt werden. Dies ist i. A. im frühen Entwicklungsstadium der protoplanetaren Akkretionsscheiben der Fall, wenn sich noch viel Masse in der Scheibe befindet. Streng genommen müßte daher die Poissongleichung des Systems Stern/Scheibe gelöst werden. Es wurde aber gezeigt, daß dies nur für Scheiben notwendig ist, deren Masse etwa so groß oder größer als das Zentralobjekt ist, also falls $M_{\mathrm{disk}} \gtrsim M_*$ gilt (Duschl et al. 2000). Solche Scheiben werden *voll selbstgravitierend* genannt. Andernfalls, wenn für die Scheibenmasse $M_{\mathrm{disk}} < M_*$ gilt, was für protoplanetare Scheiben i. A. zutrifft, reicht es aus, ausschließlich die vertikale Komponente der Gravitationsbeschleunigung der Scheibe zu berücksichtigen. Die Scheiben werden in diesem Fall *vertikal selbstgravitierend* genannt. Die Gleichung für die hydrostatische Schichtung (2.2.13) ist im vertikal selbstgravitierenden Fall zu modifizieren. Man erhält

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial z} = -\Omega^2 z - 2\pi G\Sigma \ . \tag{2.2.18}$$

Der 2. Term auf der rechten Seite stellt die Vertikalbeschleunigung in einer selbstgravitierenden unendlichen Platte dar (Paczyński 1978). Die Integration von Glg. (2.2.18) über z liefert unter der Annahme von vertikaler Isothermie

$$P(z) = P_{\mathrm{c}}\, e^{-\frac{\Omega^2}{2c_{\mathrm{s}}^2} z^2 - \frac{2\pi G\Sigma}{c_{\mathrm{s}}^2} z} \tag{2.2.19}$$

für die Druckschichtung. Die Druckskalenhöhe h_{s}, bei der $P(z = h_{\mathrm{s}}) = P_{\mathrm{c}}\, e^{-1/2}$ gilt, ist nun aus einer quadratischen Gleichung zu bestimmen. Die Lösung ist

$$h_{\mathrm{s}} = \frac{2\pi G\Sigma}{\Omega^2}\left[\sqrt{1 + \left(\frac{c_{\mathrm{s}}\Omega}{2\pi G\Sigma}\right)^2} - 1\right] \ , \tag{2.2.20}$$

[1]Ebenfalls in der Literatur gebräuchlich ist die Definition von h_{s} gemäß $P(z = h_{\mathrm{s}}) = P_{\mathrm{c}}\, e^{-1}$.

wobei der zweite Lösungszweig unphysikalische negative Scheibenhöhen liefert und daher nicht berücksichtigt werden braucht. Für den Grenzübergang zu nicht-selbstgravitierenden Scheiben, also $\Sigma \to 0$ in Glg. (2.2.20), erhält man wieder die Druckskalenhöhe für die rein hydrostatische Schichtung (2.2.17).

Mittlere Massendichte Mit Hilfe der Druckskalenhöhe läßt sich eine mittlere Massendichte definieren:

$$\rho_{\mathrm{m}} = \frac{\Sigma}{2h_{\mathrm{s}}} \; . \tag{2.2.21}$$

In der Einzonennäherung wird ρ_{m} als die Dichte in der Mittelebene der Scheibe verwendet, auch wenn dies nur näherungsweise der Fall ist.

2.2.4 Energiehaushalt der Scheibe

Viskose Dissipation Der Akkretionsprozeß in Scheiben bewirkt, daß Masse nach innen und Drehimpuls nach außen transportiert wird. Durch die Massenverlagerung im Gravitationspotential des Zentralsterns wird daher potentielle Energie gewonnen, die mittels turbulenter Reibung in Wärme dissipiert wird. Die viskose Dissipationsrate in Keplerschen Scheiben ist (Frank et al. 1992)

$$\dot{E}_{\nu} = \frac{9}{8}\,\Omega^2 \nu \Sigma \; . \tag{2.2.22}$$

Effektivtemperatur Die durch den Akkretionsprozeß gewonnene Energie wird an der Oberfläche der Scheibe abgestrahlt. Unter der Annahme, daß die Scheibe optisch dick ist, läßt sich eine Effektivtemperatur an der Scheiben-Oberfläche T_{eff} definieren, die äquivalent zur Temperatur eines schwarzen Körpers ist, der ebenso viel Energie pro Flächeneinheit wie die Scheibe abstrahlt. Für die Energiebilanz erhält man im thermischen Gleichgewicht

$$\sigma T_{\mathrm{eff}}^4 = \dot{E}_{\nu} + \sigma T_{\mathrm{cloud}}^4 \; . \tag{2.2.23}$$

σ ist die Stefan-Boltzmann-Strahlungskonstante und T_{cloud} die Temperatur der umgebenden Molekülwolke, aus deren Materie sich Stern und Scheibe gebildet haben.

Da die Scheibe in radialen Außenzonen tatsächlich vertikal optisch dünn werden kann, wird für den optisch dünnen Fall eine Korrektur nach Nakamoto & Nakagawa (1994) vorgenommen,

$$\sigma T_{\mathrm{eff}}^4 = \left(1 + \frac{1}{4\tau_{\mathrm{P}}}\right) \dot{E}_{\nu} + \sigma T_{\mathrm{cloud}}^4 \; . \tag{2.2.24}$$

Diese sorgt für einen sanften Übergang zwischen optisch dicken und optisch dünnen Scheibenbereichen. τ_{P} ist die Plancksche vertikale optische Tiefe in der Scheibe.

Im Energiehaushalt vernachlässigt wurde die Bestrahlung der Scheiben-Oberfläche durch den Stern. Diese liefert für die Scheibe, deren Öffnungswinkel i. A. nach außen hin zunimmt, einen bedeutenden Beitrag im Energiehaushalt (z.B. D'Alessio et al. 1998). In der frühen Phase der Entwicklung protoplanetarer Akkretionsscheiben ist die Akkretionsrate jedoch noch so groß, daß Akkretion die überwiegende Energiequelle zumindest in den inneren Bereichen der Scheibe darstellt. Der Energiebeitrag durch die Einstrahlung des Sterns auf die Scheiben-Oberfläche wird daher im Rahmen des Modells vernachlässigt.

2.2.5 Energietransport

Um die Energie, die beim Akkretionsprozeß überwiegend in den dichtesten Regionen nahe der Scheiben-Mittelebene gewonnen wird, an der Oberfläche abstrahlen zu können, muß sie erst dorthin transportiert werden. Dies kann in Scheiben grundsätzlich durch zwei Prozesse geschehen, nämlich durch Wärmetransport mittels Konvektion und durch Strahlungstransport. Reine Wärmeleitung scheidet aus, da diese in Akkretionsscheiben viel zu ineffektiv im Vergleich zu konvektivem Wärmetransport und Strahlungstransport ist.

Konvektiver Wärmetransport Damit Konvektion einsetzen kann, muß das Schwarzschild-Kriterium erfüllt sein, also der vertikale Temperaturgradient größer als der vertikale adiabatische Temperaturgradient sein (Schwarzschild 1958). Es wurde durch Modelle gezeigt, daß Konvektion in der Tat in Teilbereichen protoplanetarer Scheiben (nicht notwendigerweise global) vorhanden ist, jedoch nicht besonders ausgeprägt zum vertikalen Energietransport beiträgt (Lin & Papaloizou 1985). Es wird in dieser Arbeit daher der Beitrag des konvektiven Energietransports vernachlässigt.

Strahlungstransport Die Energie in der protoplanetaren Scheibe wird überwiegend durch Strahlung transportiert. Streng genommen müßte man für die korrekte Behandlung des Strahlungstransportproblems die volle Strahlungstransport-Gleichung über alle Richtungen und Frequenzen lösen. Es läßt sich diese numerisch anspruchsvolle Prozedur im Rahmen einiger Annahmen und Näherungen allerdings umgehen.
Zum einen wird angenommen, daß überall in der Scheibe lokales thermisches Gleichgewicht herrscht, d.h. die Energiezustände aller Teilchen sind thermisch besetzt. Die lokale Emissionrate von Strahlungsenergie ist dann durch die Kirchhoff-Planck-Funktion gegeben. Zudem soll Strahlungsgleichgewicht herrschen, also an jedem Ort gleich viel Strahlungsenergie von der Materie absorbiert wie re-emittiert werden. Weiterhin soll Streuung an den Teilchen der Scheibenmaterie isotrop erfolgen, was für die weitgehend optisch dicken Scheiben eine realistische Annahme darstellt. Schließlich wird die Scheibe als planparallele Schichtung angenommen, d.h. es wird vorausgesetzt, daß der radiale Temperaturgradient vernachlässigbar gegenüber dem vertikalen Temperaturgradienten ist und die Scheibe an der Oberfläche an keinem Ort stark gekrümmt ist. Die letzte Annahme folgt wieder aus der früheren Voraussetzung, daß die vertikale Ausdehnung der Scheibe viel kleiner als deren radiale Ausdehnung sein soll. Unter diesen Umständen liefert die Behandlung des Strahlungstransportproblems eine vertikale Temperaturschichtung gemäß

$$T^4(\tau) = \frac{1}{2} T_{\text{eff}}^4 \left(1 + \frac{3}{2}\tau\right) \ , \tag{2.2.25}$$

wobei T die Temperatur und τ die vertikale optische Tiefe ist. Dies ist die sog. Eddington-Barbier-Approximation für die Temperaturschichtung planparalleler Sternatmosphären (z.B. Mihalas 1978). Gemäß der Eddington-Barbier-Approximation (2.2.25) befindet sich die Scheiben-Oberfläche bei einer optischen Tiefe von $\frac{2}{3}$. Dort ist der Strahlungsfluß aus der Scheibe mit dem Strahlungsfluß in die Scheibe identisch.
Für die optisch dünnen Bereiche der Scheibe wird wieder die Näherung von Nakamoto & Nakagawa (1994) verwendet. Diese ist gegeben durch

$$\sigma T_{\text{c}}^4 = \left(\frac{3}{4}\tau_{\text{R}} + \frac{1}{4\tau_{\text{P}}}\right) \dot{E}_\nu + \sigma T_{\text{cloud}}^4 \ . \tag{2.2.26}$$

T_c ist die Temperatur in der Mittelebene der Scheibe und τ_R die Rosselandsche vertikale optische Tiefe. Für das rein radiale Scheibenmodell sind nur die physikalischen Größen in der Scheiben-Mittelebene von Interesse. Die exakte vertikale Temperaturschichtung wird nicht betrachtet.

Optische Tiefe Die vertikale optische Tiefe in der Höhe z ist definiert durch

$$\tau(z) = \int_z^\infty \rho(z')\kappa(z')\,dz' \ , \tag{2.2.27}$$

wobei κ der lokale Extinktionskoeffizient der Scheibenmaterie ist. Unter Annahme eines von z unabhängigen Extinktionskoeffizienten erhält man in der Mittelebene ($z = 0$) für die Rosselandsche bzw. Plancksche optische Tiefe

$$\tau_{\mathrm{R/P}} = \frac{1}{2}\Sigma\,\kappa_{\mathrm{R/P}} \ . \tag{2.2.28}$$

Hier sind $\kappa_{\mathrm{R,P}}$ das Rosselandmittel bzw. Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten. Es werden hier der Einfachheit halber frequenzgemittelte Extinktionskoeffizienten verwendet. Das Rosselandmittel ist das geeignete Mittel in optisch dicken Bereichen, das Planckmittel das geeignete Mittel in optisch dünnen Bereichen. Für die Berechnung von κ_{R} bzw. κ_{P} im Rahmen des Scheibenmodells wird auf Abschnitt 2.4 verwiesen.

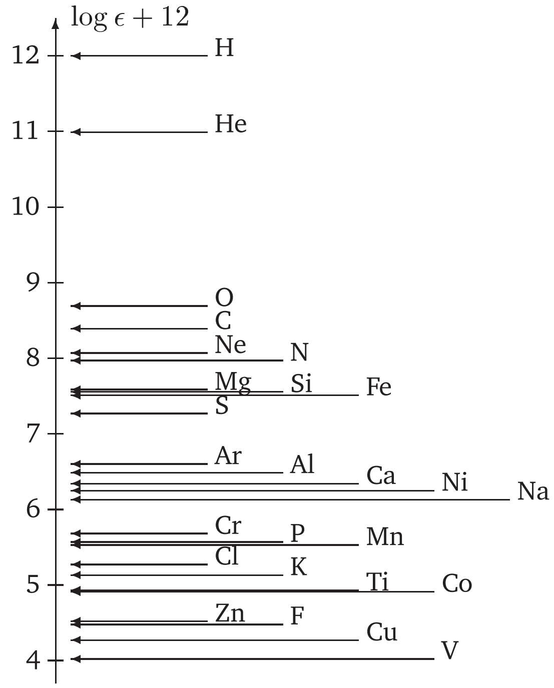
2.3 Gas- und Staubchemie

Für die Berechnung der Zusammensetzung der Gasphase sowie der Kondensation fester Substanzen aus der Gasphase wird chemisches Gleichgewicht in der Scheibe angenommen. Die Temperatur der Kondensate soll sich instantan an die Temperatur der Gasphase anpassen. Dies ist für ausreichend dichte Gase und nicht zu große Teilchen eine gute Näherung.

2.3.1 Elementhäufigkeiten

Für die Bestimmung der Zusammensetzung der Scheibenmaterie ist zunächst die Kenntnis der Häufigkeit der Elemente vonnöten. Die Elemente mit der größten Häufigkeit werden auch die häufigsten Verbindungen in der Scheibe bilden, die dann maßgeblich die Opazität der Scheibenmaterie bestimmen (siehe Abschnitt 2.4).

In Abb. 2.3.1 sind die 26 häufigsten Elemente, bezogen auf 10^{12} Atome des Wasserstoffs, nach ihrer Häufigkeit logarithmisch aufgetragen. Es wurden die kosmischen Elementhäufigkeiten nach Anders & Grevesse (1989) sowie Grevesse & Noels (1993) verwendet, mit zwei Ausnahmen. Neuere Messungen und verbesserte Modelle der Sonnenatmosphäre (Allende Prieto et al. 2002) lieferten Werte für die Häufigkeiten von Sauerstoff und Kohlenstoff, die ca. 30 % unter den ursprünglich angenommenen Werten von Anders & Grevesse (1989) liegen. Im Rahmen des Modells werden die neueren Werte der Häufigkeiten für O und C von Allende Prieto et al. (2002) verwendet.



Element	ϵ
He	$9.75 \cdot 10^{-2}$
O	$4.91 \cdot 10^{-4}$
C	$2.45 \cdot 10^{-4}$
Mg	$3.85 \cdot 10^{-5}$
Si	$3.58 \cdot 10^{-5}$
Fe	$3.24 \cdot 10^{-5}$
Al	$3.04 \cdot 10^{-6}$

Abbildung 2.3.1: Kosmische Standardelementmischung nach Anders & Grevesse (1989) sowie Grevesse & Noels (1993). Für die Häufigkeiten von Sauerstoff und Kohlenstoff wurden die neueren Werte nach Allende Prieto et al. (2002) verwendet. **Links:** Häufigkeiten ϵ der Elemente logarithmisch aufgetragen und bezogen auf 10^{12} Atome des Wasserstoffs, wie in der Theorie der Sternatmosphären gebräuchlich (Die Abbildung wurde freundlicherweise von Dr. H.-P. Gail zur Verfügung gestellt.). **Rechts:** Absolutwerte der im Modell verwendeten Elementhäufigkeiten relativ zu Wasserstoff.

Kondensationssequenz Wie man feststellt, sind unter den Bedingungen von protoplanetaren Scheiben ganz andere chemische Verbindungen möglich bzw. häufig als z.B. unter irdischen Bedingungen, wo leicht flüchtige Elemente wie Wasserstoff und die Edelgase deutlich abgereichert sind. Die Bildung einer chemischen Verbindung, insbesondere die Bildung von Kondensaten aus der Gasphase, ist allerdings nicht nur abhängig von der Häufigkeit der Bestandteile, die noch nicht für andere Verbindungen verbraucht worden sind. Sie ist auch maßgeblich davon abhängig, ob die Verbindung überhaupt stabil unter den lokalen Temperatur- und Druckbedingungen innerhalb der protoplanetaren Scheibe ist. Man kann unter diesen Voraussetzungen eine Kondensationssequenz der wichtigsten Kondensate für die Bedingungen von protoplanetaren Scheiben ableiten. Mit abnehmender Temperatur erhält man für die Kondensationssequenz grob (Grossman 1972; Gail 1998):

- Hochtemperatur-Kondensate (Ca-Al-Mg-Verbindungen) für $T \lesssim 1\,850\,\mathrm{K}$
- Hauptkondensate (Silikate, metallisches Eisen) für $T \lesssim 1\,450\,\mathrm{K}$
- Kondensate gemäßigter Temperaturen (z.B. Eisensulfid) für $T \lesssim 700\,\mathrm{K}$
- Tieftemperatur-Kondensate (Wassereis, Kohlenoxideise) für $T \lesssim 150\,\mathrm{K}$

Fester Kohlenstoff, der in die Kondensationssequenz eigentlich in die Kategorie ‚Hauptkondensate' einzuordnen wäre, ist unter den Bedingungen von protoplanetaren Scheiben nicht stabil und wird mittels Oxidation durch OH-Moleküle bereits bei geringeren Temperaturen abgebaut (siehe Abschnitt 2.5.2).

2.3.2 Kondensation fester Substanzen

Es wird nun im Detail die Berechnung der Kondensationsgrade der wichtigsten staubbildenden Elemente im Modell vorgestellt (für eine Kondensationsrechnung einer Mischung aus zahlreichen Komponenten in protoplanetaren Scheiben siehe Gail 1998). Die berechneten Kondensationsgrade gehen unmittelbar in die Berechnung der Opazität der Scheibenmaterie ein (siehe Abschnitt 2.4).

Die Festkörper sollen direkt aus der Gasphase kondensieren. Für das Auftreten von Substanzen in flüssiger Form im chemischen Gleichgewicht sind die Drücke in protoplanetaren Akkretionsscheiben zu gering. Es werden hochenergetische Prozesse wie Stoßfronten oder elektrische Entladungen, die unter den Bedingungen protoplanetarer Scheiben zu erwarten sind, der Einfachheit halber im Modell nicht berücksichtigt. Allerdings könnten diese Prozesse eine wichtige Rolle bei der Staubprozessierung in protoplanetaren Scheiben spielen, z.B. bei der Bildung der Chondren.[2]

Entscheidend für die Bildung eines Kondensates ist das *Schlüsselelement* in der Verbindung, d.h. das Element mit der geringsten Häufigkeit in der Verbindung, wenn man von Verunreinigungen im Mineral absieht. Verunreinigungen in den Kondensaten werden im Modell vernachlässigt.

Korund Wie man anhand der kosmischen Elementhäufigkeiten (Abb. 2.3.1) erkennen kann, besitzen die Hochtemperatur-Kondensate, deren Schlüsselelemente zur Bildung Ca und Al sind, eine um etwa eine Größenordnung geringere Häufigkeit als die Hauptkondensate mit den Schlüsselelementen Si und Fe. Sie sind dennoch für die Scheibenstruktur wichtig, da oberhalb von $\sim 1\,450\,\mathrm{K}$ alle anderen Staubsorten verdampft sind und somit die Hochtemperatur-Kondensate die wichtigsten Absorber in Scheibenregionen mit Temperaturen zwischen $\sim 1\,450\,\mathrm{K}$ und $\sim 1\,850\,\mathrm{K}$ darstellen.

Als Vertreter der Hochtemperatur-Kondensate im Modell wird Korund ($\mathrm{Al_2O_3}$) berücksichtigt. Andere Ca-Al-Mg-Verbindungen wie Spinell ($\mathrm{MgAl_2O_4}$), Diopsid ($\mathrm{CaMgSi_2O_6}$), Anorthit ($\mathrm{CaAl_2Si_2O_8}$) oder Melilit, das eine feste Lösung von Åkermanit ($\mathrm{MgSiCa_2SiO_7}$) und Gehlenit ($\mathrm{Al_2Ca_2SiO_7}$) darstellt, werden vernachlässigt. Sie sind weniger wichtig für die Struktur der Scheibe in den heißen, inneren Zonen. Korund ist das refraktärste unter den genannten Kondensaten und stabil bis $\sim 1\,850\,\mathrm{K}$ unter den Bedingungen protoplanetarer Scheiben.

Korund wird aus der Gasphase durch die Reaktion

$$\mathrm{2Al + 3H_2O \longrightarrow Al_2O_3(s) + 3H_2}$$

gebildet. Das ‚s' steht für ‚solidus'. Für die Bestimmung des Anteils an Molen eines Festkörpers in einer Mischung aus Gas und Kondensaten stellt die Aktivität der chemischen Verbindung die entscheidende Größe dar (z.B. Philpotts 1990). Für die Aktivität von Korund erhält man

$$a_{\mathrm{cor}} = p_{\mathrm{Al}}^2 p_{\mathrm{O}}^3 e^{-\Delta G(\mathrm{cor})/RT} \ . \tag{2.3.1}$$

[2]Chondren sind tropfenförmige, glasige Einschlüsse in Chondriten, einer Klasse der Steinmeteorite. Sie sind offenbar aus größeren Staubpartikeln hervorgegangen, die durch starke Wärmezufuhr (teilweise) verflüssigt und anschließend schnell abgekühlt wurden. Sie bestehen hauptsächlich aus Verbindungen der Klasse der Haupt- bzw. Hochtemperatur-Kondensate und besitzen Durchmesser von einigen Zehntel Millimetern bis über $1\,\mathrm{cm}$. Chondren können einen beträchtlichen Massenanteil in den Chondriten ausmachen.

Hier und im Folgenden bezeichnet $p_{\rm X}$ den Partialdruck der freien Atome des Elements X und $\Delta G({\rm Z})$ die freie Enthalpie für die Bildung des Kondensats Z aus freien Atomen. R ist die Gaskonstante. Die freie Enthalpie wird für ein thermodynamisches System mit gegebenem Druck und gegebener Temperatur extremal.
Die Druckbilanz gemäß des Massenwirkungsgesetzes für Aluminium für die Gas-Staub-Mischung ist gegeben durch

$$x_{\rm Al} p_{\rm Al} = (1 - f_{\rm cor})\, \epsilon_{\rm Al} P_{\rm H} \ . \tag{2.3.2}$$

$f_{\rm cor}$ ist der Kondensationsgrad von Aluminium in Korund, $\epsilon_{\rm X}$ die Häufigkeit des Elementes X bezogen auf Wasserstoff und $P_{\rm H}$ der fiktive Druck von H-Atomen, wenn aller Wasserstoff als freie neutrale Atome in der Gasphase vorläge. $P_{\rm H}$ wird in Abschnitt 2.3.3 berechnet. Die Größen $x_{\rm X}$ beinhalten alle sich in der Gasphase befindlichen Spezies, in denen das Element X gebunden ist. Im Falle von Aluminium folgt

$$x_{\rm Al} = 1 + p_{\rm H} \left[K_p({\rm AlH}) + p_{\rm O} \left(K_p({\rm AlOH}) + p_{\rm O} K_p({\rm AlO_2H}) \right) \right] + 2 p_{\rm Al} p_{\rm O} K_p({\rm Al_2O}) \ , \tag{2.3.3}$$

wobei $K_p({\rm Y}) = e^{-\Delta G({\rm Y})/RT}$ die Massenwirkungskonstante des Moleküls Y bezeichnet. Im Modell sind also als Spezies in der Gasphase, in denen Al gebunden ist, freie Al-Atome, AlH, AlOH, $\mathrm{AlO_2H}$ und $\mathrm{Al_2O}$ berücksichtigt.
In gleicher Weise erhält man für Sauerstoff die Massenwirkungsbilanz

$$x_{\rm O} p_{\rm O} = \epsilon_{\rm O,gas} P_{\rm H} \tag{2.3.4}$$

mit

$$\begin{aligned} x_{\rm O} = 1 &+ p_{\rm H} \left[K_p({\rm OH}) + p_{\rm H} K_p({\rm H_2O}) \right] + p_{\rm Si} K_p({\rm SiO}) \\ &+ p_{\rm Al} \left[p_{\rm H} \left(K_p({\rm AlOH}) + 2 p_{\rm O} K_p({\rm AlO_2H}) \right) + p_{\rm Al} K_p({\rm Al_2O}) \right] \ . \end{aligned} \tag{2.3.5}$$

Als Spezies in der Gasphase, die Sauerstoff enthalten, sind neben den oben genannten Al-haltigen Molekülen O, OH, $\mathrm{H_2O}$ und SiO im Modell berücksichtigt. $\epsilon_{\rm O,gas}$ in Glg. (2.3.4) ist die Häufigkeit von Sauerstoff in der Gasphase,

$$\epsilon_{\rm O,gas} = \epsilon_{\rm O} - \epsilon_{\rm C,gas} - (4 f_{\rm for} + 3 f_{\rm ens})\, \epsilon_{\rm Si} - \frac{3}{2} \epsilon_{\rm Al} f_{\rm cor} \ , \tag{2.3.6}$$

wobei $\epsilon_{\rm C,gas}$ die Häufigkeit von Kohlenstoff in der Gasphase, gegeben durch

$$\epsilon_{\rm C,gas} = \epsilon_{\rm C} \left(1 - f_{\rm car} \right) \ , \tag{2.3.7}$$

ist. Hier sind $f_{\rm for}$ und $f_{\rm ens}$ die Kondensationsgrade von Si in Forsterit bzw. Enstatit und $f_{\rm car}$ der Kondensationsgrad von C in festem Kohlenstoff. Forsterit und Enstatit binden 4 bzw. 3 Sauerstoffatome pro Atom des Schlüsselelements Si und Korund 1.5 Sauerstoffatome pro Atom des Schlüsselelements Al. In Glgen. (2.3.6) und (2.3.7) wurde des weiteren angenommen, daß der gesamte in der Gasphase verfügbare Kohlenstoff im CO-Molekül gebunden ist, obwohl Kohlenstoff in protoplanetaren Scheiben durchaus zu gewissen Mengen in $\mathrm{CO_2}$ bzw. $\mathrm{CH_4}$ gebunden sein kann (Finocchi et al. 1997; Gail 2002).
Im chemischen Gleichgewicht des Kondensates X mit der Gasphase, also im Gleichgewicht zwischen Kondensation und Sublimation, muß die Bedingung $a_{\rm X} = 1$ für die Aktivität des Kondensates erfüllt sein. Im Falle von Korund wird also $a_{\rm cor} = 1$ gesetzt und dann der Satz von Gleichungen (2.3.1) – (2.3.7) bei bekanntem $f_{\rm for}$, $f_{\rm ens}$, $f_{\rm car}$ bzw. $P_{\rm H}$ gelöst. Aus der Lösung erhält man den Kondensationsgrad von Al in Korund $f_{\rm cor}$.
Falls die Lösung $f_{\rm cor} < 0$ ergibt, ist Korund nicht stabil und es wird $f_{\rm cor} = 0$ gesetzt. In diesem Fall berechnet sich der Al-Partialdruck $p_{\rm Al}$ aus einer quadratischen Gleichung, die aus Glgen. (2.3.1) und (2.3.2) folgt.

Silikat Silikat gilt aufgrund der großen Häufigkeit seines Schlüsselelementes Silizium als eines der Hauptkondensate in protoplanetaren Scheiben. Grundbaustein der Silikate ist der $\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder.

Unterhalb von $\sim 1\,400\,\mathrm{K}$ kondensiert das Silikat Forsterit mittels der Reaktion

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

aus der Gasphase. Forsterit ist das Mg-reiche Endglied der Mischungsreihe des Inselsilikats Olivin $\mathrm{Mg}_{2x}\mathrm{Fe}_{2(1-x)}\mathrm{SiO_4}$, wobei $0 \leq x \leq 1$. Das Fe-reiche Endglied ($x = 0$) nennt man Fayalit. Als Inselsilikate werden jene Silikate bezeichnet, deren $\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder keine gegenseitigen Verknüpfungen besitzen, also als Inseln im Mineralgitter vorliegen.

Unterhalb von $\sim 1\,300\,\mathrm{K}$ ist Enstatit das stabilere Silikat.[3] Es geht im chemischen Gleichgewicht aus Forsterit durch die Reaktion

$$\mathrm{Mg_2SiO_4(s)} + \mathrm{H_2} \longrightarrow \mathrm{MgSiO_3(s)} + \mathrm{Mg} + \mathrm{H_2O}$$

hervor. Enstatit ist das Mg-reiche Endglied der Mischungsreihe des Kettensilikats Pyroxen $\mathrm{Mg}_x\mathrm{Fe}_{(1-x)}\mathrm{SiO_3}$, wobei wieder $0 \leq x \leq 1$. Das Fe-reiche Endglied ($x = 0$) heißt Ferrosilit. Kettensilikate sind Silikate, in denen die $\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder in Ketten verknüpft sind.

Unter Gleichgewichtsbedingungen in protoplanetaren Scheiben liegt das Silikat in nahezu reiner Form der Mg-reichen Endglieder von Olivin bzw. Pyroxen vor ($x \approx 1$) (Gail 1998). Daher wird jeglicher Anteil an Fe im Silikat im Modell vernachlässigt. Auch das unter den Bedingungen von protoplanetaren Scheiben möglicherweise stabile Quarz ($\mathrm{SiO_2}$) (Gail 1998) wird im Modell nicht berücksichtigt.

Die Aktivitäten von Forsterit bzw. Enstatit ergeben sich zu

$$a_{\mathrm{for}} = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{Mg}}^2 p_{\mathrm{O}}^4 e^{-\Delta G(\mathrm{for})/RT} , \tag{2.3.8}$$

$$a_{\mathrm{ens}} = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{Mg}} p_{\mathrm{O}}^3 e^{-\Delta G(\mathrm{ens})/RT} . \tag{2.3.9}$$

Die Massenwirkungsbilanzen für Silizium und Magnesium sind gegeben durch

$$x_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{Si}} = (1 - f_{\mathrm{for}} - f_{\mathrm{ens}})\, \epsilon_{\mathrm{Si}} P_{\mathrm{H}} , \tag{2.3.10}$$

$$x_{\mathrm{Mg}} p_{\mathrm{Mg}} = \epsilon_{\mathrm{Mg}} P_{\mathrm{H}} - (2 f_{\mathrm{for}} + f_{\mathrm{ens}})\, \epsilon_{\mathrm{Si}} P_{\mathrm{H}} , \tag{2.3.11}$$

mit

$$x_{\mathrm{Si}} = 1 + p_{\mathrm{O}} K_p(\mathrm{SiO}) , \tag{2.3.12}$$

$$x_{\mathrm{Mg}} = 1 , \tag{2.3.13}$$

wobei als Gasphasen-Spezies, in denen Si bzw. Mg vorliegt, Si, SiO und Mg berücksichtigt wurden. Der kleine Anteil SiS, der im chemischen Gleichgewicht in protoplanetaren Scheiben existiert, wird ebenso wie alle Mg-haltigen Moleküle ignoriert.

Für die Berechnung der Kondensationsgrade von Silizium in Forsterit und Enstatit im chemischen Gleichgewicht, f_{for} bzw. f_{ens}, werden die Aktivitäten der Kondensate in Glgen. (2.3.8) bzw. (2.3.9) gleich Eins gesetzt, $a_{\mathrm{for}} = a_{\mathrm{ens}} = 1$, und der Satz von Gleichungen (2.3.8) – (2.3.13) gelöst. Bei der Lösung müssen drei Fälle unterschieden werden:

[3] Die angegebenen Kondensationstemperaturen variieren je nach vorliegendem Druck in der Scheibe um einige $10\,\mathrm{K}$.

(i) $f_{\rm for} \geq 0$, $f_{\rm ens} \geq 0$. In diesem Fall liefert der Satz von Gleichungen (2.3.8) – (2.3.13) die Lösung für $f_{\rm for}$ und $f_{\rm ens}$.

(ii) $f_{\rm for} \geq 0$, $f_{\rm ens} < 0$. Diese Lösung entspricht dem Temperaturbereich, in dem Forsterit stabil, jedoch Enstatit nicht stabil ist. In diesem Fall wird $f_{\rm ens} = 0$ gesetzt. Aus Gleichungen (2.3.8) – (2.3.13) resultiert nun das Gleichungssystem

$$p_{\rm Si} = \frac{e^{\Delta G({\rm for})/RT}}{p_{\rm Mg}^2 p_{\rm O}^4} \, , \tag{2.3.14}$$

$$f_{\rm for} = 1 - \frac{x_{\rm Si} p_{\rm Si}}{\epsilon_{\rm Si} P_{\rm H}} \, , \tag{2.3.15}$$

$$p_{\rm Mg} = \left(\epsilon_{\rm Mg} - 2 f_{\rm for} \epsilon_{\rm Si}\right) P_{\rm H} \, . \tag{2.3.16}$$

Dieses liefert eine kubische Gleichung für $f_{\rm for}$, welche mittels eines Newton-Raphson-Iterationsverfahrens bis zu einer Genauigkeit von $7{\cdot}10^{-6}$ für den $\rm Mg$-Partialdruck $p_{\rm Mg}$ gelöst wird.

(iii) $f_{\rm for} < 0$, $f_{\rm ens} < 0$. In diesem Fall schließlich sind Silikate unter Gleichgewichtsbedingungen nicht stabil, d.h. alles $\rm Si$ bzw. $\rm Mg$ befindet sich in der Gasphase. Es wird $f_{\rm for} = f_{\rm ens} = 0$ gesetzt, und die Partialdrücke von $\rm Si$ bzw. $\rm Mg$ ergeben sich aus

$$p_{\rm Si} = \frac{\epsilon_{\rm Si} P_{\rm H}}{x_{\rm Si}} \, , \tag{2.3.17}$$

$$p_{\rm Mg} = \frac{\epsilon_{\rm Mg} P_{\rm H}}{x_{\rm Mg}} \, . \tag{2.3.18}$$

Die Gleichungen (2.3.1) – (2.3.18) stellen ein nicht-lineares Gleichungssystem für die Kondensationsgrade $f_{\rm cor}$, $f_{\rm for}$ und $f_{\rm ens}$ sowie die Partialdrücke der Atome der in Korund, Forsterit und Enstatit gebundenen Elemente dar. Das Gleichungssystem wird mit Hilfe einer Fixpunkt-Iteration bis zu einer Genauigkeit von $8{\cdot}10^{-6}$ für den Sauerstoff-Partialdruck $p_{\rm O}$ gelöst.[4]

Eisen Ein weiteres Hauptkondensat in protoplanetaren Scheiben stellt metallisches Eisen dar. Präziser formuliert, kondensiert eine Lösung aus Eisen, Nickel und anderen eisenfreundlichen Spurenelementen. Aufgrund der um mehr als eine Größenordnung größeren Häufigkeit von Eisen gegenüber Nickel (Abb. 2.3.1) wird Nickel wie auch mögliche Spurenelemente im metallischen Eisen vernachlässigt.

Eisen kondensiert aus der Gasphase unterhalb von $\sim 1\,450\,{\rm K}$ direkt aus den freien Atomen, also mittels der Reaktion

$${\rm Fe} \longrightarrow {\rm Fe(s)}$$

Die Aktivität von Eisen ist demnach durch

$$a_{\rm iro} = p_{\rm Fe} e^{-\Delta G({\rm iro})/RT} \tag{2.3.19}$$

gegeben. Für die Massenwirkungsbilanz folgt

$$x_{\rm Fe} p_{\rm Fe} = \left(1 - f_{\rm iro}\right) \epsilon_{\rm Fe} P_{\rm H} \, , \tag{2.3.20}$$

[4]Die in den Modellrechnungen verwendeten Genauigkeiten der Iterationen stellen einen Kompromiß zwischen erforderlicher Genauigkeit und Rechengeschwindigkeit dar.

wobei $f_{\rm iro}$ der Kondensationsgrad von Fe in metallischem Eisen und

$$x_{\rm Fe} = 1 \tag{2.3.21}$$

ist. Es wird folglich nur atomares Eisen in der Gasphase berücksichtigt, da alle Fe-haltigen Moleküle aufgrund ihrer geringen Häufigkeit vernachlässigbar sind.

Der Kondensationsgrad von Eisen $f_{\rm iro}$ wird unter der Bedingung $a_{\rm iro} = 1$ aus dem Satz von Gleichungen (2.3.19) – (2.3.21) bestimmt. Im Falle von $f_{\rm iro} < 0$ wird $f_{\rm iro} = 0$ gesetzt.

Kondensate gemäßigter Temperaturen, unter ihnen Eisensulfid (FeS) als wichtigster Vertreter, werden im Modell nicht berücksichtigt. Der Einfluß dieser Kondensate auf die Scheibenstruktur ist gering, so daß diese vernachlässigt werden.

Eis Bei niedrigen Temperaturen beginnen die leicht flüchtigen Substanzen auf den vorhandenen Staubkörnern auszufrieren. Unterhalb von $\sim 150\,\rm K$ kondensiert Wasser (H_2O) als erster und wichtigster Vertreter der Eiskondensate. Dies geschieht mittels der direkten Reaktion

$$\rm H_2O \longrightarrow H_2O(s)\ .$$

Wie man anhand der Häufigkeit von Sauerstoff in Abb. 2.3.1 feststellen kann, stellt Wassereis das häufigste Kondensat in den kühlen Außenregionen protoplanetarer Scheiben dar und bildet beträchtliche Mäntel um die Staubkerne.

Weitere wichtige Eise stellen Kohlenmonoxid (CO), Kohlendioxid (CO_2) und Methan (CH_4) dar, deren Sublimationsprodukte man in den Spektren der Kometen beobachtet. Diese Eise kondensieren auf die wassereisummantelten Staubkerne erst in großer Entfernung zum Protostern. Dort ist das vorliegende Scheibenmodell nicht mehr anwendbar, da in dieser Entfernung die Scheiben weitgehend vertikal optisch dünn sind und z.B. die Wechselwirkung der Scheibenmaterie mit dem kosmischen Strahlungsfeld und dem Strahlungsfeld der umgebenden Sterne wichtig wird. Sämtliche Eiskondensate mit Ausnahme von Wassereis werden daher im Modell vernachlässigt.

Die Aktivität von Wassereis ist gegeben durch

$$a_{\rm ice} = p_{\rm H_2O}\, e^{-\Delta G({\rm ice})/RT} = \frac{p_{\rm H_2O}}{p_{\rm v,H_2O}}\ , \tag{2.3.22}$$

wobei $p_{\rm v,H_2O}$ der Dampfdruck von H_2O über Wassereis ist. Für die Massenwirkungsbilanz folgt

$$p_{\rm H_2O} = (1 - f_{\rm ice})\, \epsilon_{\rm O,gas} P_{\rm H}\ . \tag{2.3.23}$$

Hier ist $f_{\rm ice}$ der Kondensationsgrad von Sauerstoff in Wassereis und $\epsilon_{\rm O,gas}$ die Häufigkeit des in der Gasphase verbliebenen Sauerstoffs, welche aus Glg. (2.3.6) berechnet wird.

Im chemischen Gleichgewicht gilt $a_{\rm ice} = 1$. Mit Hilfe dieser Bedingung kann bei bekanntem $p_{\rm v,H_2O}$ der Kondensationsgrad von Sauerstoff in Wassereis $f_{\rm ice}$ aus Glgen. (2.3.22) und (2.3.23) bestimmt werden.

Im Falle von $f_{\rm ice} < 0$ wird $f_{\rm ice} = 0$ gesetzt, und $p_{\rm H_2O}$ ist gegeben durch Glg. (2.3.23).

2.3.3 Gaschemie

Dissoziation von H_2 Im Modell wird die thermische Dissoziation des H_2-Moleküls berücksichtigt. Diese ist für die Berechnung der Scheibenstruktur wichtig, da H_2 das mit Abstand häufigste Molekül ist.

Die Reaktionsgleichung ist gegeben durch

$$\mathrm{H}_2 \longrightarrow \mathrm{H} + \mathrm{H}\ .$$

Die Massenwirkungsbilanz der Reaktion ist demzufolge

$$p_{\mathrm{H}_2} = p_{\mathrm{H}}^2\, K_p(\mathrm{H}_2) = p_{\mathrm{H}}^2\, e^{-\Delta G(\mathrm{H}_2)/RT}\ . \tag{2.3.24}$$

Der fiktive Druck von H-Atomen, wenn aller Wasserstoff in Form von freien neutralen Atomen in der Gasphase vorläge, läßt sich zum einen aus den Partialdrücken von H und H_2 gemäß

$$P_{\mathrm{H}} = p_{\mathrm{H}} + 2p_{\mathrm{H}_2}\ . \tag{2.3.25}$$

berechnen. Andererseits ist P_{H} bei gegebener Dichte ρ und Temperatur T durch die Zustandsgleichung des idealen Gases bestimmt,

$$P_{\mathrm{H}} = \sum_i n_i k_{\mathrm{B}} T \approx \frac{\rho}{m_{\mathrm{H}}(1 + 4\epsilon_{\mathrm{He}})} k_{\mathrm{B}} T\ , \tag{2.3.26}$$

wobei n_i die Teilchendichte der Gasspezies i bezeichnet. Es wurde hier der geringe Beitrag von Elementen schwerer als Helium zur Teilchendichte vernachlässigt und das Atomgewicht von Helium $A_{\mathrm{He}} = 4$ gesetzt.

Gleichungen (2.3.24) und (2.3.25) liefern eine quadratische Gleichung für den Partialdruck von freien Wasserstoffatomen p_{H}, deren Lösung

$$p_{\mathrm{H}} = \sqrt{\frac{1}{16\, K_p^2(\mathrm{H}_2)} + \frac{P_{\mathrm{H}}}{2\, K_p(\mathrm{H}_2)}} - \frac{1}{4\, K_p(\mathrm{H}_2)} \tag{2.3.27}$$

ist. Der andere Lösungszweig führt zu unphysikalischen negativen Drücken. Aus der Lösung läßt sich anschließend p_{H_2} aus Glg. (2.3.24) bestimmen.

Die H_2-Dissoziation setzt in protoplanetaren Scheiben bei Temperaturen oberhalb $\sim 2\,000\,\mathrm{K}$ ein. Der Einfluß der Dissoziation anderer Moleküle auf die Scheibenstruktur ist vernachlässigbar.

Helium Der Partialdruck des nach Wasserstoff zweithäufigsten Elementes Helium ist gegeben durch

$$p_{\mathrm{He}} = \epsilon_{\mathrm{He}} P_{\mathrm{H}}\ . \tag{2.3.28}$$

Das Edelgas Helium geht keine chemischen Verbindungen ein.

Kohlenmonoxid Die wichtigste Gasphasen-Spezies, die Kohlenstoff bindet, ist das CO-Molekül. Es bildet sich überwiegend aus der Reaktion

$$\mathrm{C} + \mathrm{O} \longrightarrow \mathrm{CO}\ .$$

Der Partialdruck von CO ist gegeben durch

$$p_{\mathrm{CO}} = p_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{O}}\, K_p(\mathrm{CO})\ . \tag{2.3.29}$$

Der Partialdruck von atomarem Kohlenstoff ist bestimmt durch die Gleichung

$$x_{\mathrm{C}} p_{\mathrm{C}} = \epsilon_{\mathrm{C,gas}} P_{\mathrm{H}} \tag{2.3.30}$$

mit

$$x_{\mathrm{C}} = 1 + p_{\mathrm{O}}\, K_p(\mathrm{CO})\ , \tag{2.3.31}$$

wobei $\epsilon_{\mathrm{C,gas}}$ durch Glg. (2.3.7) gegeben ist. Damit läßt sich der Partialdruck von CO, p_{CO}, aus Glgen. (2.3.29) – (2.3.31) berechnen.

Wasserdampf Das $\mathrm{H_2O}$-Molekül bildet sich aus der Reaktion

$$2\mathrm{H} + \mathrm{O} \longrightarrow \mathrm{H_2O}\ .$$

Der Wasserdampf-Partialdruck berechnet sich aus

$$p_{\mathrm{H_2O}} = p_{\mathrm{O}} p_{\mathrm{H}}^2\, K_p(\mathrm{H_2O})\ . \tag{2.3.32}$$

Hydroxyl-Radikal Das OH-Radikal wird gebildet mittels der Reaktion

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

Der OH-Partialdruck ist bestimmt durch

$$p_{\mathrm{OH}} = p_{\mathrm{O}} p_{\mathrm{H}}\, K_p(\mathrm{OH})\ . \tag{2.3.33}$$

Siliziummonoxid SiO bildet sich aus der Reaktion

$$\mathrm{Si} + \mathrm{O} \longrightarrow \mathrm{SiO}\ .$$

Demzufolge ist der Partialdruck von SiO gegeben durch

$$p_{\mathrm{SiO}} = p_{\mathrm{Si}} p_{\mathrm{O}}\, K_p(\mathrm{SiO})\ . \tag{2.3.34}$$

Mittleres Molekulargewicht Aus den Partialdrücken der Gasspezies in der Scheibe läßt sich nun das mittlere Molekulargewicht der Scheibenmaterie bestimmen. Es ist gegeben durch

$$\mu = \frac{\rho k_{\mathrm{B}} T}{m_{\mathrm{H}}(p_{\mathrm{H}} + p_{\mathrm{H_2}} + p_{\mathrm{He}})}\ , \tag{2.3.35}$$

wobei wieder alle Elemente schwerer als Helium vernachlässigt wurden. Das mittlere Molekulargewicht geht bei der Berechnung der Scheibenstruktur in die Gleichung für die Schallgeschwindigkeit (2.2.15) ein. Im Fall der vollständigen Assoziation von $\mathrm{H_2}$ beträgt μ etwa $\frac{7}{3}$, im Fall der vollständigen Dissoziation von $\mathrm{H_2}$ etwa $\frac{14}{11}$.
Der Einfluß der Ionisation auf μ wird im Modell vernachlässigt. Die Ionisation der häufigsten Elemente Wasserstoff und Helium in protoplanetaren Scheiben setzt erst bei Temperaturen oberhalb $\sim 7\,000\,\mathrm{K}$ bzw. $\sim 15\,000\,\mathrm{K}$ ein. Derart hohe Temperaturen werden in den in dieser Arbeit betrachteten Scheibenmodellen allerdings nirgendwo erreicht.

2.3.4 Freie Bildungs-Enthalpien der chemischen Verbindungen

Die Massenwirkungskonstante einer chemischen Verbindung K_p ist gegeben durch

$$K_p(T) = e^{-\Delta G(T)/RT} , \tag{2.3.36}$$

wobei R die Gaskonstante, T die Temperatur und ΔG die freie Enthalpie für die Bildung der Verbindung ist. Die Bestimmung der freien Bildungs-Enthalpien der in dieser Arbeit berücksichtigten Spezies ist in Anhang A.1 beschrieben.

2.4 Opazität

Die Opazität der Scheibenmaterie spielt für die Struktur der Scheibe eine ganz entscheidende Rolle. Sie bestimmt im wesentlichen den Transport der Strahlung in der Scheibe und damit die Effizienz, mit der die Scheibe durch entweichende Strahlung kühlen kann. Die zugehörige physikalische Größe ist der Massenextinktionskoeffizient κ, gemessen in Einheiten $\mathrm{cm}^2\,\mathrm{g}^{-1}$.[5]

2.4.1 Staubopazität

Die Opazität in protoplanetaren Scheiben wird vom Staub dominiert. Der überwiegende Teil der Gesamtmasse des Staubs liegt dabei in Form von feinkörnigen Partikeln mit Durchmessern unter $\sim 1\,\mu\mathrm{m}$ vor. In dieser Form lag der Staub ursprünglich im Interstellaren Medium (ISM) vor, bevor dieser beim Sternentstehungsprozeß in die protoplanetare Scheibe eingebaut wurde. Die Opazität des Gases ($\sim 10^{-4}\,\mathrm{cm}^2\,\mathrm{g}^{-1}$) ist in Regionen, in denen Staub existiert, gegenüber der Opazität der Staubteilchen ($\sim 1\,\mathrm{cm}^2\,\mathrm{g}^{-1}$) zu vernachlässigen.

Der Staub ist ein thermischer Strahler. In den dichten Regionen nahe der Mittelebene der Scheibe besitzt der Staub die gleiche Temperatur wie das Umgebungsgas. Nur an der Oberfläche der Scheibe und in den Bereichen weit entfernt von der Protosonne kann z.B. absorbierte Ultraviolett-Strahlung der Protosonne die Staubteilchen zeitweise über Umgebungstemperatur erhitzen, da in diesen weniger dichten Regionen der Temperaturausgleich zwischen Gas und Staub nur langsam abläuft. Man kann also in hinreichend genauer Näherung annehmen, daß die Staubteilchen in den dichtesten, chemisch aktiven Bereichen der Scheibe als schwarze Körper mit der Temperatur ihrer Umgebung strahlen.

Die Wellenlänge der maximalen Strahlungsintensität $\lambda_{\max}$ eines schwarzen Körpers ist nach dem Wienschen Verschiebungsgesetz gegeben durch

$$\lambda_{\max} T = 0.2898\,\mathrm{cm\,K} . \tag{2.4.1}$$

Da Staub in protoplanetaren Scheiben bis zu Temperaturen von $\lesssim 1\,800\,\mathrm{K}$ existiert, gibt dieser den Hauptanteil seiner Energie folglich als Infrarot- oder Submillimeter-Strahlung ab. Eine weitere Folgerung des Wienschen Verschiebungsgesetzes ist, daß für den Radius der Staubteilchen a die Bedingung $a \ll \lambda$ erfüllt ist. Die optischen Eigenschaften der Staubteilchen lassen sich folglich im Grenzfall kleiner Teilchen bestimmen (Rayleigh-Limit).

[5] Es werden in dieser Arbeit die in der Astrophysik gebräuchlichen cgs-Einheiten verwendet.

Koagulation Das Rayleigh-Limit ist allerdings nicht für die Bestimmung der optischen Eigenschaften der Staubteilchen anwendbar, wenn diese durch gegenseitige Stöße zu größeren Agglomeraten heranwachsen. Dieser Prozeß der *Koagulation* der Staubteilchen wird für die Bildung größerer Körper in protoplanetaren Scheiben verantwortlich gemacht. Die Endprodukte des Koagulationsprozesses sind letztendlich Asteroide, Kometen und Planeten, wie sie im heutigen Sonnensystem vorzufinden sind.

Es folgt nun eine Abschätzung der Zeitskala der Koagulation in protoplanetaren Scheiben. Diese ist gegeben durch die Zeitskala für gegenseitige Stöße zwischen Staubteilchen

$$\tau_{\rm coag} = \frac{1}{n_{\rm d} v_{\rm d} \sigma_{\rm d}} , \qquad (2.4.2)$$

wobei $n_{\rm d}$ die Teilchendichte der Staubteilchen, $v_{\rm d}$ die Relativgeschwindigkeit zwischen Staubteilchen und $\sigma_{\rm d}$ der Stoßquerschnitt ist. Typische Werte für protoplanetare Scheiben sind $n_{\rm d} = 100\,{\rm cm}^{-3}$ bei $1\,{\rm AU}$ (z.B. Wehrstedt & Gail 2002), $\sigma_{\rm d} = 3{\cdot}10^{-10}\,{\rm cm}^2$ für Teilchen mit $0.1\,\mu{\rm m}$ Durchmesser (Radius $a = 0.05\,\mu{\rm m}$) und $v_{\rm d} \approx 0.1\,{\rm cm\,s}^{-1}$ für die Brownsche Bewegung mikrometergroßer Partikel im Scheibengas (z.B. Weidenschilling & Cuzzi 1993). Mit diesen Werten ergibt sich nach Glg. (2.4.2) eine typische Koagulationszeitskala von ~ 10 Jahren.

Nimmt man nun eine Temperatur von $600\,{\rm K}$ bei $1\,{\rm AU}$ an (dies entspricht nach den Modellrechnungen von Wehrstedt & Gail (2002) einer Entwicklungszeit des solaren Nebels von $\sim 5{\cdot}10^5\,{\rm a}$), dann liefert das Wiensche Gesetz (2.4.1) eine Wellenlänge von $\sim 4.5\,\mu{\rm m}$ für die maximale Strahlungsintensität. Das Rayleigh-Limit ist somit noch gerade erfüllt für Teilchen von $\sim 4.5\,\mu{\rm m}$ Größe. Falls Partikel dieser Größe durch Koagulation aus Staubteilchen von $0.1\,\mu{\rm m}$ Durchmesser gebildet wurden, dann enthalten diese Cluster $\sim 10^5$ Staubteilchen. Wenn weiterhin jeder Stoß die Staubpartikel aneinander haften läßt, dann wird für die Bildung von $\sim 4.5\,\mu{\rm m}$ großen Staubpartikeln ein Zeitraum von $\sim 5{\cdot}10^5\,{\rm a}$ benötigt.

Dies ist auch die Zeitskala, während der das Rayleigh-Limit für die Regionen der Scheibe mit $r \gtrsim 1\,{\rm AU}$ noch erfüllt ist. Selbst bei Bildung von Partikeln, für die das Rayleigh-Limit nicht mehr erfüllt ist, dürfte nach fortgeschrittener Entwicklungszeit der protoplanetaren Scheibe ein ausreichend großes Ensemble kleiner Staubteilchen vorhanden bleiben, da bei einem gewissen Bruchteil der Stöße die Staubpartikel zu kleineren Teilchen fragmentieren. Dies dürfte in der Region der Scheibe mit $r \lesssim 1\,{\rm AU}$ der Fall sein, in der die Staubteilchendichte groß und die Scheibe heiß ist, d.h. die Wahrscheinlichkeit von Stößen vergrößert und $\lambda_{\rm max}$ in Glg. (2.4.1) zu kleineren Werten hin verschoben ist.

Mit diesen Überlegungen erscheinen die Modellrechnungen dieser Arbeit, die die Koagulation des Staubs nicht berücksichtigen, bis zu einer Entwicklungszeit der Scheibe von $10^6\,{\rm a}$ gerechtfertigt. Die Berechnung der optischen Eigenschaften des Staubs wird demzufolge im Rayleigh-Limit vollzogen.

MRN-Verteilung Für die Staubteilchen wird die Größenverteilung nach Mathis, Rumpl & Nordsieck (1977) (kurz MRN-Verteilung) verwendet. Diese wurde für ISM-Staub durch Anpassung der interstellaren Extinktionskurve abgeleitet. Die MRN-Verteilung ist gegeben durch

$$f(a) = \begin{cases} 0 & : \; a < a_{\rm min} \\ C{\cdot}a^{-3.5} & : \; a_{\rm min} \le a \le a_{\rm max} \\ 0 & : \; a > a_{\rm max} \end{cases} , \qquad (2.4.3)$$

wobei $a_{\rm min} = 0.005\,\mu{\rm m}$ und $a_{\rm max} = 0.25\,\mu{\rm m}$ die untere bzw. obere Grenze der Radiusverteilung ist. Die Konstante C ist durch

$$\log C = \begin{cases} -15.24 & \text{für C-Staub} \\ -15.21 & \text{für Si-Staub} \end{cases} \tag{2.4.4}$$

gegeben. Die Verteilungsfunktion $f(a)$ in Glg. (2.4.3) gibt die Zahl der Staubteilchen pro Radius-Intervall in $\mu{\rm m}$ und pro Wasserstoffkern an. Der Radius a in (2.4.3) ist ebenfalls in Einheiten von $\mu{\rm m}$ anzugeben.

Absorption und Streuung Prinzipiell wechselwirkt Strahlung mit Materie durch zwei unterschiedliche Prozesse: Absorption und Streuung. Im Rahmen dieses Modells werden die Absorption und die Streuung an kleinen, homogenen, kugelförmigen Staubteilchen betrachtet.

Der Absorptions- und der Streuquerschnitt kleiner, kugelförmiger Staubteilchens bei der Frequenz ν ist gegeben durch (z.B. Bohren & Huffman 1983)

$$\sigma_\nu^{\rm abs} = \pi a^2\, Q_\nu^{\rm abs} \qquad\qquad \sigma_\nu^{\rm sca} = \pi a^2\, Q_\nu^{\rm sca}\ . \tag{2.4.5}$$

Die Größen $Q_\nu^{\rm abs}$ und $Q_\nu^{\rm sca}$ stellen die Effizienz des Absorptions- bzw. Streuprozesses dar. Der frequenzabhängige Absorptions- bzw. Streukoeffizient ist definiert durch

$$k_\nu^{\rm abs} = n_{\rm d}\sigma_\nu^{\rm abs} \qquad\qquad k_\nu^{\rm sca} = n_{\rm d}\sigma_\nu^{\rm sca}\ . \tag{2.4.6}$$

Für die Berechnung der Opazität der Scheibenmaterie werden der Massenabsorptions- und Massenstreukoeffizient verwendet,

$$\kappa_\nu^{\rm abs} = \frac{k_\nu^{\rm abs}}{\rho} \qquad\qquad \kappa_\nu^{\rm sca} = \frac{k_\nu^{\rm sca}}{\rho}\ , \tag{2.4.7}$$

wobei ρ die Massendichte der Materie ist.

Um $\kappa_\nu^{\rm abs}$ und $\kappa_\nu^{\rm sca}$ für eine gegebene Staubsorte bestimmen zu können, müssen die Effizienzfaktoren $Q_\nu^{\rm abs}$ und $Q_\nu^{\rm sca}$ (Glg. (2.4.5)) bekannt sein. Diese lassen sich auf Basis der Mie-Theorie (Mie 1908) bei gegebenen optischen Konstanten der Materialien (komplexe Dielektrizitätskonstante $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ oder komplexer Brechungsindex $m = n + ik$) und vorgegebener Größenverteilung der Staubsorten berechnen.

Extinktion Der frequenzabhängige Massenextinktionskoeffizient der Materie ist durch die Summe der Absorption und der Streuung aller Spezies gegeben:

$$\kappa_\nu^{\rm ext} = \sum \left(\kappa_\nu^{\rm abs} + \kappa_\nu^{\rm sca}\right)\ . \tag{2.4.8}$$

Die Berechnung des Strahlungstransports in der protoplanetaren Scheibe (Abschnitt 2.2.5) erfolgt im Rahmen des Modells mittels frequenzgemittelter Massenextinktionskoeffizienten. Für die optisch dicken Bereiche der Scheibe ist das Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten die geeignete Größe. Es ist gegeben durch

$$\kappa_{\rm R} = \int_0^\infty \frac{\partial B_\nu}{\partial T}\, d\nu \left[\int_0^\infty \frac{1}{\kappa_\nu^{\rm ext}} \frac{\partial B_\nu}{\partial T}\, d\nu\right]^{-1}\ , \tag{2.4.9}$$

wobei $B_\nu(T)$ die Planckfunktion ist. Für die optisch dünnen Bereiche der Scheibe wird das Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten verwendet,

$$\kappa_{\mathrm{P}} = \int_0^\infty \kappa_\nu^{\mathrm{ext}} B_\nu(T)\, d\nu \left[\int_0^\infty B_\nu(T)\, d\nu\right]^{-1} . \tag{2.4.10}$$

Staubopazität im Modell Gail (persönliche Mitteilung) hat mit Hilfe der Mie-Theorie (Mie 1908) die Rosseland- und Planckmittel der Massenextinktionskoeffizienten der unterschiedlichen im Modell berücksichtigten Staubabsorber berechnet. Dabei wurde eine MRN-Größenverteilung (Glg. 2.4.3) für alle Staubsorten angenommen. Die Rosseland- und Planckmittel der Opazität wurden daraufhin mittels temperaturabhängiger Approximationsformeln angepaßt. Die Approximationsformeln für die einzelnen Staubabsorber sind in Anhang A.2.1 aufgeführt. Dort findet sich auch die Angabe der Bezugsquelle der optischen Konstanten, die zur Berechnung der κ_{R} bzw. κ_{P} der unterschiedlichen Staubspezies verwendet wurden.

Sei $\kappa_{\mathrm{R,Z}}$ und $\kappa_{\mathrm{P,Z}}$ das Rosseland- bzw. Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten der Staubsorte Z. Dann ist das Rosseland- bzw. Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten des gesamten Staubs (ohne Eis) gegeben durch

$$\kappa_{\mathrm{R/P,dust}} = f_{\mathrm{car}}\kappa_{\mathrm{R/P,car}} + f_{\mathrm{ens}}\kappa_{\mathrm{R/P,ens}} + f_{\mathrm{for}}\kappa_{\mathrm{R/P,for}} + f_{\mathrm{iro}}\kappa_{\mathrm{R/P,iro}} + f_{\mathrm{cor}}\kappa_{\mathrm{R/P,cor}} . \tag{2.4.11}$$

Die Opazitäten der einzelnen Kondensate wurden dabei jeweils mit dem Kondensationsgrad des Schlüsselelements des Kondensats multipliziert. Für die Berechnung der Kondensationsgrade f_{Z} im Modell wird auf Abschnitt 2.3.2 verwiesen (bzw. auf Abschnitt 2.5 für die Berechnung von f_{car}).

Die Silikate können im Rahmen des Modells in amorpher wie kristalliner Form vorkommen. Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität der Silikate Forsterit bzw. Enstatit wird ermittelt aus

$$\kappa_{\mathrm{R/P,for}} = f_{\mathrm{cry,for}}\kappa_{\mathrm{R/P,for,cry}} + (1 - f_{\mathrm{cry,for}})\,\kappa_{\mathrm{R/P,sil,am}} , \tag{2.4.12}$$

$$\kappa_{\mathrm{R/P,ens}} = f_{\mathrm{cry,ens}}\kappa_{\mathrm{R/P,ens,cry}} + (1 - f_{\mathrm{cry,ens}})\,\kappa_{\mathrm{R/P,sil,am}} . \tag{2.4.13}$$

$f_{\mathrm{cry,for}}$ und $f_{\mathrm{cry,ens}}$ sind die mittleren Kristallisationsgrade von Forsterit bzw. Enstatit. Diese werden in Abschnitt 2.5 berechnet. Bei der Opazität des rein amorphen Silikats wird nicht zwischen Forsterit und Enstatit unterschieden, sondern angenommen, daß das amorphe Silikat als ursprünglicher ISM-Staub im chemischen Ungleichgewicht vorliegt.

Im Rahmen der Berechnung der Staubopazität werden die Rosselandmittel der Einzelabsorber aufsummiert. Dies ist für ein Gemisch aus unterschiedlichen Spezies nur dann exakt, wenn graue Extinktion vorliegt, d.h. der Extinktionskoeffizient der einzelnen Absorber frequenzunabhängig ist. Es stellt jedoch beim Auftreten von wenigen dominierenden Absorbern, wie es im Rahmen des Scheibenmodells der Fall ist, eine hinreichend genaue Näherung dar.

Des weiteren wird bei der Berechnung der Staubopazität davon ausgegangen, daß die MRN-Größenverteilung für den Staub auch bei dessen Zerstörung und Rekondensation erhalten bleibt. Dies ist i. A. nicht der Fall. Die Opazität eines Kondensats hängt im Rayleigh-Limit jedoch praktisch nicht vom Radiusspektrum, sondern hauptsächlich vom Volumen der kondensierten Materie ab. Die Form des Radiusspektrums muß für die Berechnung der Opazität folglich nicht exakt bekannt sein, solange es sich um kleine Teilchen handelt.

2.4.2 Gasopazität

In den Regionen der Scheibe, in denen der Staub verdampft ist ($T \gtrsim 1\,850\,\mathrm{K}$), kommen andere Absorber zum Tragen. Dies sind:

- Moleküle (Rotations-Schwingungs-Übergänge) für $1\,850\,\mathrm{K} \lesssim T \lesssim 4\,000\,\mathrm{K}$
- H^--Ionen (*gf*- und *ff*-Übergänge) für $4\,000\,\mathrm{K} \lesssim T \lesssim 8\,000\,\mathrm{K}$
- Atome und Ionen (*gf*- und *ff*-Übergänge) für $8\,000\,\mathrm{K} \lesssim T \lesssim 30\,000\,\mathrm{K}$
- Elektronen (Thompson-Streuung) für $T \gtrsim 30\,000\,\mathrm{K}$

In den Klammern sind die Strahlungsprozesse aufgeführt, die für die Extinktion jeweils verantwortlich sind. Die Abkürzungen ‚*gf*' und ‚*ff*' stehen für gebunden-frei-Übergänge bzw. frei-frei-Übergänge.

Thermische Instabilität Da die Scheiben in den Modellrechnungen dieser Arbeit nie heißer als $\sim 4\,000\,\mathrm{K}$ werden, brauchen bei der Berechnung der Gasopazität nur die Moleküle berücksichtigt zu werden. Alle anderen Gasabsorber werden vernachlässigt. Dies hat den Vorteil, daß auf diese Weise das Auftreten von Mehrdeutigkeiten in der Lösung des Scheibenmodells umgangen wird, wie es im Bereich der Absorption des negativen Wasserstoff-Ions (H^-) der Fall ist. Mehrdeutige Lösungen, d.h. für einen gegeben Radius r existiert mehr als eine Lösung für die Temperatur, treten z.B. dann auf, wenn der Extinktionskoeffizient κ sehr stark mit der Temperatur ansteigt. Dies ist gerade in dem Bereich der Fall, in dem die H^--Absorption dominiert. Die Mehrdeutigkeit der Lösung hat eine thermische Instabilität in der Scheibe zur Folge. Diese Instabilität wird für ausgeprägte, dynamische Phänomene in der frühen Entwicklungsphase von protoplanetaren Scheiben verantwortlich gemacht, wie sie in den FU Orionis Objekten beobachtet werden (Bell & Lin 1994; Hartmann & Kenyon 1996).

Gasabsorber im Modell Die wichtigsten Moleküle, die zur Opazität beitragen, sind $\mathrm{H_2O}$, OH, CO und TiO mit ihren zahlreichen Rotations-Schwingungs-Übergängen. Die exakte Berechnung des Massenextinktionskoeffizienten der Moleküle κ_{mol} erfordert die Berücksichtigung vieler Millionen Rotations-Schwingungs-Übergänge. Im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch eine Approximationsformel für κ_{mol} verwendet, die von Keeley (1970) für die Modellierung der kühlen Atmosphären pulsierender Riesensterne eingeführt wurde. Diese ist in Anhang A.2.2 aufgeführt. In der Approximationsformel ist der Beitrag von TiO zur Molekülopazität nicht berücksichtigt. Aus diesem Grund ist im Modell die TiO-Absorption nicht berücksichtigt.

2.4.3 Gesamtopazität

Rosselandmittel Das Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten des Staub-Gas-Gemischs der Scheibe wird mittels

$$\kappa_{\mathrm{R}} = f_{\mathrm{ice}}\kappa_{\mathrm{R,ice}} + (1 - f_{\mathrm{ice}})\,\kappa_{\mathrm{R,dust}} + (1 - f_{\mathrm{cor}})\,\kappa_{\mathrm{mol}} \tag{2.4.14}$$

berechnet. Die Ausdrücke in den Klammern in Glg. (2.4.14) sorgen für einen sanften Übergang von κ_{R} in den Regionen der Eissublimation und der Verdampfung der letzte Staubsorte (Korund). Dies gewährleistet numerische Stabilität bei der Berechnung des Scheibenmodells in den Bereichen der Scheibe, in denen die Opazität die steilsten räumlichen Gradienten aufweist.

Im Ausdruck (2.4.14) wurde – wie bei der Berechnung der Staubopazität – über die einzelnen Absorber summiert, d.h. graue Extinktion angenommen.

Planckmittel Auf gleiche Weise wie in Glg. (2.4.14) für das Rosselandmittel erfolgt die Berechnung des Planckmittels des Massenextinktionskoeffizienten:

$$\kappa_{\mathrm{P}} = f_{\mathrm{ice}}\kappa_{\mathrm{P,ice}} + (1 - f_{\mathrm{ice}})\,\kappa_{\mathrm{P,dust}} + (1 - f_{\mathrm{cor}})\,\kappa_{\mathrm{mol}}\ . \tag{2.4.15}$$

2.5 Stofftransport

Die Struktur von protoplanetaren Scheiben kann wesentlich durch radiale und vertikale Mischungsvorgänge beeinflußt werden. Durch Transport können Stoffe (Tracer) in Scheibenregionen gelangen, in denen die dort vorherrschenden physikalischen und chemischen Bedingungen deren Bildung nicht zulassen. Die transportierten Stoffe können die lokalen physikalischen Bedingungen ihrer neuen Umgebung verändern; beispielsweise kann eine Veränderung der Opazität hervorgerufen werden.

Die Opazität der Scheibenmaterie verändert sich vor allem in Bereichen der Scheibe, in denen wichtige Absorber abgebaut werden, also vor allem in den Regionen der Staubverdampfung und der Eissublimation. Aber auch andere Arten der Staubprozessierung modifizieren die Opazität der Scheibenmaterie. Im vorliegenden Modell werden zwei Arten der Prozessierung des Staubs berücksichtigt: (1) das Annealing des Silikatstaubs und (2) die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs. Die Berücksichtigung dieser Prozesse gemeinsam mit dem Transport der Reaktionsprodukte führt in Modellen von protoplanetaren Scheiben zu einer deutlichen Veränderung der Scheibenstruktur (Wehrstedt & Gail 2002).

2.5.1 Annealing der Silikate

Der Staub in der protoplanetaren Scheibe, so wie er aus dem ISM stammend beim Sternentstehungsprozeß in die Scheibe eingebaut wird, befindet sich zunächst nicht im chemischen Gleichgewicht. Beispielsweise liegt die Silikatkomponente des Staubs im ISM überwiegend in amorpher Form vor, d.h. die Gitterstruktur des Festkörpers ist charakterisiert durch eine globale Unordnung der einzelnen atomaren Grundbausteine ($\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder). In den warmen inneren Regionen der Scheibe setzen allerdings Umordnungsprozesse im Mineralgitter ein, die zu einer mehr oder weniger kristallinen Gitterstruktur des Mineralkorns führen. Dieser Prozeß der Kristallisation eines anfänglich amorphen Festkörpers durch reine Temperaturwirkung wird als *thermisches Annealing*[6] bezeichnet.

Der Massenextinktionskoeffizient von kristallinem Silikat ist etwa eine Größenordnung kleiner als der von amorphem Silikat. Da Silikat eines der Hauptkondensate in protoplanetaren Scheiben darstellt und daher über seine Opazität die Scheibenstruktur maßgeblich

[6] In der Werkstoffkunde ist der Begriff *Tempern* gebräuchlich.

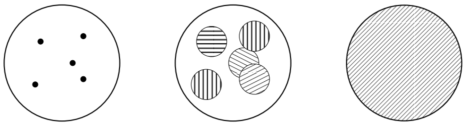


Abbildung 2.5.1: Illustration eines Annealing-Ereignisses. **Links:** Amorphes Silikatteilchen mit einigen Zentren der Nukleation für den Kristallisationsprozeß. **Mitte:** Die Kristallisationszentren wachsen mittels Annealing. **Rechts:** Das Silikatteilchen ist vollständig kristallisiert. Für Details siehe Text.

mitbestimmt, ist es wichtig, das Annealing sowie den räumlichen Transport des Silikatstaubs in Modellen protoplanetarer Scheiben zu berücksichtigen.

Ein weiterer Grund, warum das Annealing und der Transport des Silikatstaubs im Modell berücksichtigt wird, ist, daß dieser Prozeß eine natürliche Erklärung für das Auftreten von kristallinem Silikat in vielen Kometen bietet. Für die Diskussion dieses Sachverhaltes wird auf Abschnitt 2.8 verwiesen.

Die Veränderung der Opazität durch das Annealing anderer wichtiger Staubsorten sowie von Eis fällt nicht derart drastisch aus wie beim Silikatstaub. Das Annealing anderer Staubsorten als der Silikate sowie das Annealing von Eis wird im Modell daher nicht berücksichtigt.

Kristallisationsprozeß In Abb. 2.5.1 ist die mögliche Sequenz eines Annealing-Ereignisses dargestellt. Zunächst liegt das Silikatteilchen mit vollständig amorpher Textur vor (Abb. 2.5.1 links). Aus statistischen Gründen existieren jedoch immer kleine Bereiche im Festkörper, in denen das Mineralgitter eine geordnete, d.h. kristalline Struktur aufweist. Diese Bereiche wirken als Keimzentren für den beginnenden Kristallisationsprozeß. Bei ausreichend hohen Temperaturen beginnen die $\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder die Energiebarrieren zu überwinden, die sie zuvor daran gehindert haben, energetisch günstigere Positionen und Orientierungen im Gitter einzunehmen. Es wachsen kristalline Gebiete um die Keimzentren (Abb. 2.5.1 Mitte). Schließlich, wenn das Annealing-Ereignis lange genug andauert, wird das Silikatteilchen vollständig kristallisiert (Abb. 2.5.1 rechts). Der Silikatstaub in protoplanetaren Scheiben liegt folglich in amorpher, teilweise kristallisierter und vollständig kristallisierter Form vor.[7]

Kristallisationsgrad Der Grad der Kristallisation eines Staubteilchens wird im Rahmen des Modells definiert als

$$x_{\mathrm{cry}} = \min\left(\frac{n_{\mathrm{cry}} V_{\mathrm{cry}}}{V_{0,\mathrm{sil}}}, 1\right) . \tag{2.5.1}$$

Hier ist n_{cry} die Anzahl der Keimzentren pro Siliziumatom im Gitter vor Einsetzen des Kristallisationsprozesses, V_{cry} das Volumen eines an einem einzelnen Keimzentrum gewachsenen kristallinen Gebietes und $V_{0,\mathrm{sil}}$ das Volumen, das ein $\mathrm{SiO_4}$-Tetraeder im Gitter einnimmt. Der Kristallisationsgrad ist folglich unabhängig von der Größe des Staubteilchens, wobei $0 \leq x_{\mathrm{cry}} \leq 1$ gilt.

Gail (1998) hat eine Gleichung für das Wachstum des Volumens V_{cry} eines kristallinen Gebiets um ein gesondertes Keimzentrum abgeleitet. Diese ist gegeben durch

$$\frac{dV_{\mathrm{cry}}}{dt} = 6\, V_{0,\mathrm{sil}}^{1/3} V_{\mathrm{cry}}^{2/3} \nu_{\mathrm{vib}}\, e^{-E_{\mathrm{a}}/k_{\mathrm{B}}T} . \tag{2.5.2}$$

[7] Die Berechnung der Opazität der kristallinen Silikate im Modell (Abschnitt 2.4.1) erfolgt unter der Annahme von monokristallinen Teilchen. Dabei wird vernachlässigt, daß der Silikatstaub nach vollständiger Kristallisation eigentlich eine mikrokristalline Struktur aufweist.

$\nu_{\rm vib}$ ist die charakteristische Frequenz von Gitterschwingungen und $E_{\rm a}$ die Aktivierungsenergie für Umordnungsprozesse im Gitter infolge des Annealings. Bei der Herleitung von Glg. (2.5.2) wurde ein sphärisches Wachstum der kristallinen Gebiete angenommen und vernachlässigt, daß bei fortgeschrittener Kristallisation des Teilchens die kristallinen Gebiete überlappen (siehe Abb. 2.5.1). Dies dürfte allerdings nur einen geringen Einfluß auf die Ergebnisse des Modells haben, da das Überlappen der kristallinen Gebiete erst wichtig wird, wenn das Staubkorn bereits zu einem großen Teil kristallisiert ist.

Aus Glgen. (2.5.1) und (2.5.2) folgt für die Zunahme des Kristallisationsgrads

$$\frac{dx_{\rm cry}}{dt} = \begin{cases} 6\,x_{\rm cry}^{2/3} n_{\rm cry}^{1/3} \nu_{\rm vib}\, e^{-E_{\rm a}/k_{\rm B}T} & : \quad 0 \le x_{\rm cry} < 1 \\ 0 & : \quad x_{\rm cry} = 1 \end{cases} . \tag{2.5.3}$$

Es ist nun von Vorteil, die Variable $\xi = x_{\rm cry}^{1/3}$ einzuführen. In diesem Fall ergibt sich aus Glg. (2.5.3)

$$\frac{d\xi}{dt} = \begin{cases} 2\,n_{\rm cry}^{1/3} \nu_{\rm vib}\, e^{-E_{\rm a}/k_{\rm B}T} & : \quad 0 \le \xi < 1 \\ 0 & : \quad \xi = 1 \end{cases} , \tag{2.5.4}$$

d.h. die rechte Seite von (2.5.4) hängt nicht von ξ ab.

Charakteristische Zeitskala des Annealing Anhand von Glg. (2.5.4) läßt sich eine charakteristische Zeitskala des Annealingprozesses definieren. Diese ist gegeben durch

$$\tau_{\rm ann} = \frac{\Delta\xi}{2\,n_{\rm cry}^{1/3} \nu_{\rm vib}}\, e^{E_{\rm a}/k_{\rm B}T} , \tag{2.5.5}$$

wobei $\Delta\xi = \Delta(x_{\rm cry}^{1/3})$ die Zunahme der dritten Wurzel des Kristallisationsgrads des Staubteilchens in der Zeit $\tau_{\rm ann}$ angibt.

Im Modell ist die Zahl der Keimzentren bei der Kristallisation auf $n_{\rm cry} = 10^{-5}$ gesetzt. Die Variation dieses Wertes hat keinen großen Einfluß auf die Ergebnisse des Modells. Für die charakteristische Frequenz von Gitterschwingungen wird $\nu_{\rm vib} = 2{\cdot}10^{13}\,{\rm s}^{-1}$ angenommen (Lenzuni et al. 1995; Duschl et al. 1996). Die Aktivierungsenergie $E_{\rm a}$ für Umordnungsprozesse im Gitter wurde von unterschiedlichen Gruppen in Experimenten für das Annealing von Silikatstäuben abgeleitet (Nuth & Donn 1982; Hallenbeck et al. 1998, 2000; Brucato et al. 1999; Fabian et al. 2000). Im Rahmen dieser Arbeit werden die Werte $E_{\rm a}/k_{\rm B} = 39\,100{\pm}400$ und $42\,040{\pm}150\,{\rm K}$ für Forsterit bzw. Enstatit von Fabian et al. (2000) verwendet.

In Abb. 2.5.2 sind die mit diesen Zahlenwerten berechneten charakteristischen Zeitskalen für das Annealing von Forsterit (durchgezogene Linie) bzw. Enstatit (gestrichelte Linie) dargestellt. Dabei wurde die vollständige Kristallisation der Silikatteilchen angenommen, d.h. $\Delta\xi = 1$ in Glg. (2.5.5) gesetzt. Forsterit kristallisiert vollständig nach $1\,{\rm a}$ bei einer Temperatur von $874\,{\rm K}$ und nach $100\,{\rm a}$ bei einer Temperatur von $792\,{\rm K}$.[8] Die entsprechenden Werte für Enstatit sind 939 bzw. $852\,{\rm K}$.

[8]Die angegebenen Zeiträume sind kurz gegenüber der viskosen Zeitskala (Glg. (2.2.12)), d.h. der Zeitskala, in der sich die Scheibe hydrodynamisch entwickelt.

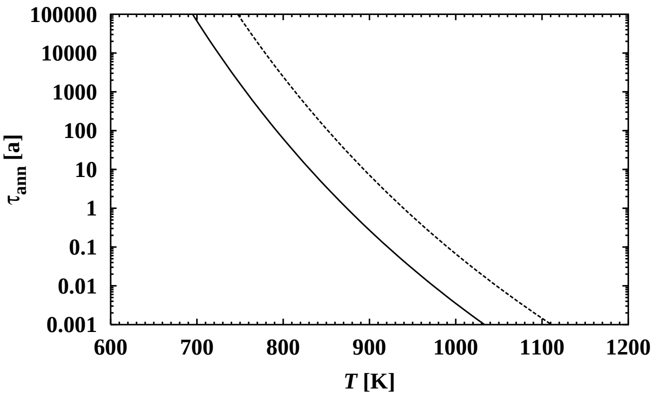


Abbildung 2.5.2: Charakteristische Zeitskala des Annealings τ_{ann} von Forsterit (durchgezogene Linie) und Enstatit (gestrichelte Linie) nach Glg. (2.5.5) in Abhängigkeit von der Temperatur.

2.5.2 Verbrennung des Kohlenstoffstaubs

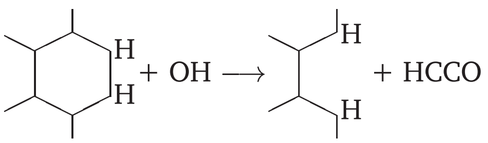
Die meisten Staubsorten in protoplanetaren Scheiben werden bei ausreichend hohen Temperaturen durch den Prozeß der Verdampfung zerstört. Durch thermischen Kontakt mit dem Umgebungsgas werden dabei die Festkörper so weit aufgeheizt, bis die chemischen Bindungen des Festkörpers aufgebrochen und dieser nach und nach aufgelöst wird.[9]

Im Falle des Kohlenstoffstaubs konnten Duschl et al. (1996) zeigen, daß dieser unter den Bedingungen von protoplanetaren Scheiben nicht durch Sublimation, sondern bereits bei geringeren Temperaturen durch Oxidationsreaktionen mit OH-Molekülen zerstört wird. Die Zerstörung von Ruß in protoplanetaren Scheiben beruht folglich auf einem Verbrennungsprozeß.

Kohlenstoffstaub stellt einen der Hauptabsorber in den Scheiben dar. Es ist es daher wichtig, die Verbrennung samt räumlichem Transport des Kohlenstoffstaubs in Modellen von protoplanetaren Scheiben zu berücksichtigen.

Zudem bietet der radiale Transport von Reaktionsprodukten der Kohlenstoffverbrennung eine mögliche Erklärung für die beträchtliche Menge an Kohlenwasserstoffen, vorwiegend Methan ($\mathrm{CH_4}$), die in den Kometen vorgefunden wird. Für eine eingehendere Diskussion dieses Sachverhaltes wird erneut auf Abschnitt 2.8 verwiesen.

Die Verbrennungsreaktion Nach der Modellvorstellung von Duschl et al. (1996) bzw. Finocchi et al. (1997) ist die grundlegende Reaktion der Kohlenstoffoxidation in protoplanetaren Scheiben gegeben durch



(2.5.6)

Ein OH-Molekül bricht dabei einen aromatischen 6-fach Ring an der Oberfläche des Rußteilchens auf, wobei ein HCCO in die Gasphase entweicht. Es wird im Modell also angenommen, daß der Kohlenstoffstaub aus einem Konglomerat solcher 6-fach Ringe besteht und z.B. nicht in der Form von meteoritischem Kerogen vorkommt. Bei Kerogen ist

[9] Möglicherweise stellt bei einigen Staubsorten in protoplanetaren Scheiben das thermische Sputtering einen gegenüber der Sublimation konkurrierenden Prozeß der Staubzerstörung dar. Für den Fall der Silikate siehe hierzu Duschl et al. (1996).

das Netzwerk von aromatischen Ringen durch Brücken von –CH_2– oder –CH_2–O–CH_2–Gruppen verbunden, ähnlich der Struktur von Kohle (Anders & Kerridge 1988). Genausowenig soll fester Kohlenstoff in Form von Graphit oder gar Diamant auftreten.

Veränderung des Teilchenradius' bei der Kohlenstoffverbrennung Nach Duschl et al. (1996) ist die Veränderung des Radius' $a_{\rm car}$ von kugelförmigen Rußteilchen bei der Kohlenstoffverbrennung bestimmt durch

$$\frac{\mathrm{d}a_{\rm car}}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} -V_{0,\rm car}\alpha_{\rm ox}n_{\rm OH}v_{\rm th,OH} & : \quad a_{\rm car} > 0 \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases} . \tag{2.5.7}$$

$V_{0,\rm car}$ ist das Volumen eines C-Atoms in festem Kohlenstoff, gegeben durch

$$V_{0,\rm car} = \frac{A_{\rm C}m_{\rm H}}{\rho_{\rm car}} , \tag{2.5.8}$$

wobei $A_{\rm C}$ das Atomgewicht von Kohlenstoff, $m_{\rm H}$ die Masse des Wasserstoffatoms und $\rho_{\rm car} = 2.26\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ die Massendichte von festem Kohlenstoff (Graphit) ist. In Glg. (2.5.7) stellt des weiteren $\alpha_{\rm ox}$ die Wahrscheinlichkeit dar, daß der Stoß eines OH-Moleküls mit der Oberfläche des Rußteilchens tatsächlich zu einer Reaktion gemäß (2.5.6) führt. Da die Oxidation von Ruß ein in der Technik häufig anzutreffender Prozeß ist (z.B. in Kerzenflammen), ist $\alpha_{\rm ox}$ recht genau im Labor bestimmt worden. Es wird im Rahmen dieser Arbeit $\alpha_{\rm ox} = 0.1$ gesetzt und auf die Diskussion in Finocchi et al. (1997) verwiesen. Schließlich ist $n_{\rm OH}$ in Glg. (2.5.7) die Teilchendichte von OH, bestimmt durch Glgen. (2.3.33) bzw. (A.2.16), und $v_{\rm th,OH}$ die thermische Geschwindigkeit der OH-Moleküle,

$$v_{\rm th,OH} = \sqrt{\frac{k_{\rm B}T}{2\pi m_{\rm OH}}} , \tag{2.5.9}$$

wobei $m_{\rm OH}$ die Masse des OH-Moleküls ist.

Charakteristische Zeitskala der Kohlenstoffverbrennung Die charakteristische Zeitskala, in der Kohlenstoffstaub in protoplanetaren Scheiben verbrennt, wird anhand Glg. (2.5.7) definiert durch

$$\tau_{\rm car} = \frac{\Delta a_{\rm car}}{V_{0,\rm car}a_{\rm ox}n_{\rm OH}}\sqrt{\frac{2\pi m_{\rm OH}}{k_{\rm B}T}} . \tag{2.5.10}$$

$\Delta a_{\rm car}$ ist die Verminderung des Radius' von Rußteilchen in der Zeit $\tau_{\rm car}$.

Wie man anhand von Glg. (2.5.10) feststellt, ist die Geschwindigkeit des Abbaus des Kohlenstoffstaubs nicht nur von der Temperatur, sondern maßgeblich von der OH-Teilchendichte abhängig. Letztere wiederum ist eine Funktion der Temperatur, des Drucks, der Bindungsenergie von OH sowie der Häufigkeiten sauerstoffhaltiger Spezies im Scheibenmedium (Wasserstoff ist aufgrund seiner großen Häufigkeit praktisch unbegrenzt für chemische Verbindungen verfügbar).

In Abb. 2.5.3 ist $\tau_{\rm car}$ nach Glg. (2.5.10) in Abhängigkeit von der Temperatur und der OH-Teilchendichte aufgetragen. Die Abbildung bestätigt, daß $\tau_{\rm car}$ hauptsächlich von $n_{\rm OH}$ und

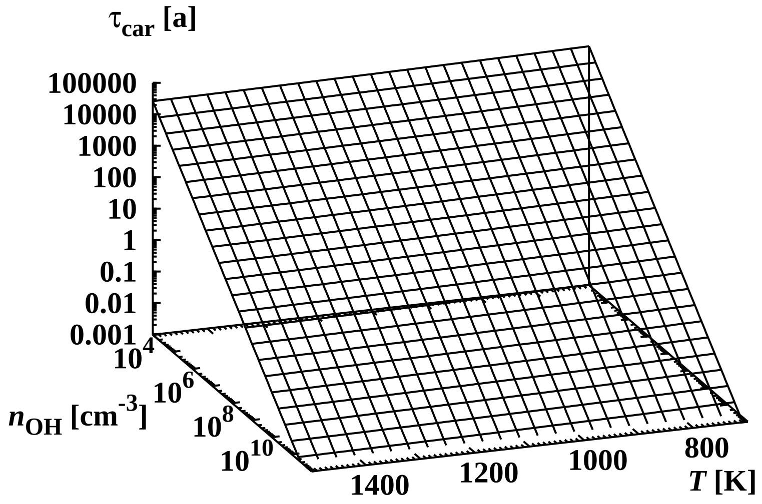


Abbildung 2.5.3: Charakteristische Zeitskala der Kohlenstoffverbrennung τ_{car} nach Glg. (2.5.10) in Abhängigkeit von der Temperatur T und der Teilchendichte der OH-Moleküle n_{OH}.

nur wenig von der Temperatur abhängig ist. Nimmt man eine Temperatur von $1\,000\,\mathrm{K}$ sowie OH-Teilchendichten von $n_{\mathrm{OH}} = 10^7\,cm^{-3}$ und $10^{10}\,cm^{-3}$ an, dann benötigen Rußteilchen mit einem Radius von $0.25\,\mu\mathrm{m}$ (die obere Grenze der MRN-Radiusverteilung, siehe Glg. (2.4.3)) etwa 3.2 Jahre bzw. etwa 1 Tag zur vollständigen Verbrennung. Verglichen mit der viskosen Zeitskala (2.2.12), der Zeitskala der hydrodynamischen Entwicklung der Scheibe (vergl. Abb. 2.2.1), erfolgt die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs in protoplanetaren Scheiben bei OH-Teilchendichten von mehr als $\sim 10^7\,cm^{-3}$ folglich nahezu instantan.

2.5.3 Die Transport-Reaktions-Gleichung

Der Stofftransport in den Scheiben geschieht prinzipiell durch zwei Prozesse: Advektion und Diffusion. Die Advektion ist ein gerichteter Prozeß, der durch eine Transportgeschwindigkeit beschrieben wird. Die Diffusion ist ein ungerichteter Prozeß und ist bestimmt durch einen Diffusionskoeffizienten.

Hirschfelder et al. (1964) hat eine Gleichung für den Transport von Stoffen in einem Trägergas für den Fall abgeleitet, bei dem die Teilchendichten der Tracer weit geringer als die Gesamtteilchendichte des Trägergases sind. In diesem Fall können die einzelnen Tracer unabhängig voneinander behandelt werden. Die Gleichung nach Hirschfelder et al. (1964) lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} nc_i + \underline{\nabla} \cdot nc_i \underline{v}_i = \underline{\nabla} \cdot nD_i \, \underline{\nabla}\, c_i + R_i \; . \tag{2.5.11}$$

Hier bezeichnet $\underline{\nabla}$ den räumlichen Gradienten, n die Teilchendichte des Trägergases, $\underline{v}_i$ den Geschwindigkeitsvektor des Tracers i und c_i die Konzentration des Tracers i,

$$c_i = \frac{n_i}{n} \; , \tag{2.5.12}$$

wobei n_i die Teilchendichte des i-ten Tracers ist. Des weiteren stellt in Glg. (2.5.11) D_i den Diffusionskoeffizienten für die Diffusion des i-ten Tracers im Medium des Trägergases dar.

Schließlich beschreibt der Ratenterm R_i die Veränderung der Teilchendichte des Tracers i pro Wasserstoffatom und Zeiteinheit. Der Ratenterm wird in Abschnitt 2.5.4 beschrieben.

Die Anwendung der Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \underline{\nabla} \cdot n\underline{v} = 0 \tag{2.5.13}$$

auf Glg. (2.5.11) ergibt (vergl. Gail 2001)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla}\, c_i = \frac{1}{n}\, \underline{\nabla} \cdot nD_i\, \underline{\nabla}\, c_i + \frac{R_i}{n}\ , \tag{2.5.14}$$

wobei $\underline{v}$ das Geschwindigkeitsfeld des Trägergases darstellt. Beim letzten Schritt wurde angenommen, daß die Geschwindigkeitsvektoren des Tracers und des Trägergases identisch sind, d.h. $\underline{v} = \underline{v}_i$ gilt. Die Rechtfertigung für diese Vereinfachung folgt weiter unten in diesem Abschnitt.

Gleichung (2.5.14) wird als *Transport-Reaktions-Gleichung* des Tracers i bezeichnet. Der zweite Term der linken Seite in der Transport-Reaktions-Gleichung (2.5.14) wird *Advektionsterm* und der erste Term auf der rechten Seite *Diffusionsterm* genannt. Die Advektion eines Tracers erfolgt entlang der Richtung des Geschwindigkeitsfeldes des Mediums $\underline{v}$. Die Diffusion besitzt die Eigenschaft, räumliche Gradienten der Tracer-Konzentration zu eliminieren, welche z.B. durch die Erzeugung oder Zerstörung eines Tracers entstehen können.

Die Transport-Reaktions-Gleichung im Scheibenmodell Die Transport-Reaktions-Gleichung (2.5.14) wird im Rahmen des Einzonenmodells in Zylinderkoordinaten dargestellt (vergl. Abschnitt 2.1.1). Die Transformation von Gleichung (2.5.14) in Zylinderkoordinaten unter Ausnutzung der Axialsymmetrie der Scheibe ergibt

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_i}{\partial r} + v_z \frac{\partial c_i}{\partial z} = \frac{1}{rn} \frac{\partial}{\partial r}\, rnD_i \frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z}\, nD_i \frac{\partial c_i}{\partial z} + \frac{R_i}{n}\ . \tag{2.5.15}$$

v_z ist die vertikale Driftgeschwindigkeit. Die Terme für die Advektion und Diffusion in Glg. (2.5.15) erscheinen im Vergleich zu Glg. (2.5.11) nun jeweils aufgespalten in eine radiale und eine vertikale Komponente.

In der Einzonennäherung wird die Auflösung der vertikalen Raumrichtung vernachlässigt. Die endgültige Form der Transport-Reaktions-Gleichung im Rahmen des radialen Modells lautet somit (vergl. auch Gail 2001; Wehrstedt & Gail 2002; Wehrstedt & Gail 2003)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_i}{\partial r} = \frac{1}{rn} \frac{\partial}{\partial r}\, rnD_i \frac{\partial c_i}{\partial r} + \frac{R_i}{n}\ . \tag{2.5.16}$$

Sofern Einfall von Materie auf die Scheibe berücksichtigt wird, erhält Glg. (2.5.16) bzw. die allgemeinere Gleichung (2.5.14) noch einen Zusatzterm. Masseneinfall auf die Scheibe wird – wie bereits erwähnt – im Modell vernachlässigt, so daß der entsprechende Term nicht berücksichtigt werden muß.

Diffusionskoeffizient Im Abschnitt über die Viskosität 2.2.2 wurde dargelegt, daß protoplanetare Scheiben eine weitaus größere Viskosität aufweisen als allein molekulare Viskosität. Der Grund hierfür ist vermutlich die ausgeprägte Turbulenz in den Scheiben. Im

Rahmen des Modells wird angenommen, daß diese Turbulenz auch für den diffusiven Transport von Materie in der Scheibe verantwortlich ist.

Unter dieser Voraussetzung stehen der Diffusionskoeffizient und die Viskosität linear miteinander in Beziehung. Für den Diffusionskoeffizienten des Tracers i gilt

$$D_i = \frac{\nu}{S_i} \,, \tag{2.5.17}$$

wobei S_i die Schmidt-Zahl des i-ten Tracers im Trägergas ist.

Die Schmidt-Zahl ist eine inverse Prandtl-Zahl und macht eine Aussage über die Stärke der Kopplung eines Tracers an die Bewegung des Trägergases. Für gasförmige Tracer gilt $S_i \approx 1$ (Waldmann 1958). Die Bewegung von Festkörpern im Trägergas dagegen wird durch die Reibung der Körper am Gas mitbestimmt, d.h. die Schmidt-Zahl ist maßgeblich von der Größe der Körper abhängig.

In Modellen, die das Wachstums von Staubpartikeln in protoplanetaren Scheiben durch Koagulation berechneten, konnte gezeigt werden, daß Körper bis zu einer Größe von $\sim 1\,\mathrm{mm}$ vollständig an die Gasbewegung koppeln (z.B. Weidenschilling & Cuzzi 1993). Im vorliegenden Modell beträgt der maximale Radius der Staubteilchen nach der MRN-Verteilung (2.4.3) $0.25\,\mu\mathrm{m}$. Da Koagulation im Modell nicht berücksichtigt ist, befinden sich die Staubteilchen in dem Grenzfall, bei dem sie gänzlich von der Gasbewegung mitgerissen werden. Für die Schmidt-Zahl wird daher im Modell vereinfacht

$$S_i = 1 \tag{2.5.18}$$

gesetzt.

In der Tat findet man in Laborexperimenten für kleine Teilchen Schmidt-Zahlen in der Größenordnung von Eins, typischerweise $S_i \approx 0.7$ (Launder 1976; McComb 1990), im geringen Maße abhängig von der Teilchengeometrie. Mit der Wahl (2.5.18) wird also das Ausmaß der turbulenten Diffusion in den dichten inneren Bereichen der Scheibe im Modell leicht unterschätzt. In den äußeren Scheibenregionen ($r \gtrsim 100\,\mathrm{AU}$) ist im Gegensatz dazu die Dichte so gering, daß selbst μm-große Teilchen durch Reibung nicht mehr vollständig an die Gasbewegung koppeln. In den Außenregionen der Scheibe – soweit Tracer überhaupt dorthin gelangen – wird folglich der Transport durch turbulente Diffusion im Modell überschätzt.

Die Wahl $S_i = 1$ rechtfertigt das Gleichsetzen der Geschwindigkeitsvektoren von Trägergas und Tracer $\underline{v}$ bzw. $\underline{v}_i$ bei der Herleitung der Transport-Reaktions-Gleichung (siehe Glg. (2.5.14)). Denn ebenso wie es bei der Diffusion der Fall ist, koppelt bei der Advektion die Tracerbewegung im Grenzfall mikroskopischer Staubteilchen vollständig an die Gasbewegung.

Die Schmidt-Zahl wurde ursprünglich zur Beschreibung der zufallsbestimmten thermischen Bewegung von Staubpartikeln eingeführt (Waldmann 1958). Das Anwendungsgebiet der Schmidt-Zahl wurde hier auf den diffusiven Transport durch Turbulenz erweitert.

2.5.4 Die Ratenterme

Für die Lösung der Transport-Reaktions-Gleichung (2.5.16) ist die Angabe der Ratenterme für die unterschiedlichen Tracer vonnöten. Die im Modell berücksichtigten Tracer sind

Silikat-Staubteilchen (Forsterit, Enstatit) mit unterschiedlichem Kristallisationsgrad sowie Kohlenstoff-Staubteilchen unterschiedlicher Größe. Die Silikat-Staubteilchen kristallisieren durch Annealing sukzessiv, und die Kohlenstoff-Staubteilchen werden mittels Verbrennung durch OH-Moleküle abgebaut, d.h. sie verringern ihre Größe.

Nach Gail (2001) bzw. Wehrstedt & Gail (2002) besitzt der Ratenterm bezüglich eines Tracers i die Form

$$\frac{R_i}{n} = \frac{c_{i-1}}{\tau_{i-1}} - \frac{c_i}{\tau_i} \,. \tag{2.5.19}$$

τ_i stellt die charakteristische Zeitskala der Veränderung einer Eigenschaft des Tracers i dar (z.B. Staubteilchen-Radius oder Kristallisationsgrad), so daß nach der Zeit τ_i die Umwandlung in den Tracer $i+1$ erfolgt ist. Die Konzentration c_i des Tracers i kann sich demnach auf zwei Arten verändern:

(1) Zuwachs durch Umwandlung des Tracers $i-1$ in den Tracer i in der Zeit τ_{i-1} (1. Term auf der rechten Seite von Glg. (2.5.19))

(2) Verminderung durch Umwandlung des Tracers i in den Tracer $i+1$ in der Zeit τ_i (2. Term auf der rechten Seite von Glg. (2.5.19))

Ratenterme für das Annealing der Silikate Im Falle des Silikatstaubs wird zunächst der Kristallisationsgrad x_{cry} (Glg. (2.5.1)) diskretisiert, d.h. in I_{sil} diskrete Werte $x_{i,\mathrm{cry}}$ mit $i = 1 \ldots I_{\mathrm{sil}}$ aufgeteilt, wobei $x_{1,\mathrm{cry}} = 0$ (amorphes Silikat) und $x_{I_{\mathrm{sil}},\mathrm{cry}} = 1$ (vollständig kristallisiertes Silikat) ist. Mit wachsendem i nimmt folglich der Kristallisationsgrad zu. Die Ratenterme für das Annealing der Silikate (Forsterit, Enstatit) lauten dann gemäß (2.5.19)

$$\frac{R_{i,\mathrm{for}}}{n} = \frac{c_{i-1,\mathrm{for}}}{\tau_{i-1,\mathrm{for}}} - \frac{c_{i,\mathrm{for}}}{\tau_{i,\mathrm{for}}} \qquad \frac{R_{i,\mathrm{ens}}}{n} = \frac{c_{i-1,\mathrm{ens}}}{\tau_{i-1,\mathrm{ens}}} - \frac{c_{i,\mathrm{ens}}}{\tau_{i,\mathrm{ens}}} \,, \tag{2.5.20}$$

wobei $\tau_{i,\mathrm{for}}$ und $\tau_{i,\mathrm{ens}}$ die charakteristischen Zeitskalen der Kristallisation von Forsterit bzw. Enstatit vom anfänglichen Kristallisationsgrad $x_{i,\mathrm{cry}}$ hin zum Kristallisationsgrad $x_{i+1,\mathrm{cry}}$ darstellen. Die charakteristischen Zeitskalen der Kristallisation für Forsterit bzw. Enstatit sind nach Glg. (2.5.5) gegeben durch

$$\tau_{i,\mathrm{for}} = \frac{x_{i+1,\mathrm{cry}}^{1/3} - x_{i,\mathrm{cry}}^{1/3}}{2\, n_{\mathrm{cry}}^{1/3} \nu_{\mathrm{vib}}} \, e^{E_{\mathrm{a,for}}/k_{\mathrm{B}}T} \qquad \tau_{i,\mathrm{ens}} = \frac{x_{i+1,\mathrm{cry}}^{1/3} - x_{i,\mathrm{cry}}^{1/3}}{2\, n_{\mathrm{cry}}^{1/3} \nu_{\mathrm{vib}}} \, e^{E_{\mathrm{a,ens}}/k_{\mathrm{B}}T} \,. \tag{2.5.21}$$

Die Werte für die Aktivierungsenergien $E_{\mathrm{a,for}}$ bzw. $E_{\mathrm{a,ens}}$ sind in Abschnitt 2.5.1 angegeben.

Die Ratenterme sind, so wie in Glg. (2.5.20) dargestellt, nur für die Kristallisationsniveaus $i = 2 \ldots (I_{\mathrm{sil}} - 1)$ gültig. Im Niveau $i = 1$ für amorphes Silikat dagegen kann kein Zuwachs aus einem tieferliegenden Niveau erfolgen. In diesem Fall ist der erste Term der rechten Seiten der Ratenterme (2.5.20) jeweils zu ignorieren. Im Niveau $i = I_{\mathrm{sil}}$ für vollständig kristallisiertes Silikat kann darüber hinaus kein Verlust zu einem höherliegenden Niveau stattfinden, da der Kristallisationsgrad Eins nicht übersteigen kann. In diesem Fall ist der zweite Term der rechten Seiten der Ratenterme (2.5.20) jeweils zu ignorieren.

Ratenterm für die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs Im Falle des Kohlenstoffstaubs wird der Teilchenradius $a_{\rm car}$ diskretisiert, d.h. in $I_{\rm car}$ diskrete Werte $a_{i,\rm car}$ mit $i = 1 \ldots I_{\rm car}$ aufgeteilt, wobei $a_{1,\rm car} = 0.25\,\mu{\rm m}$ (obere Grenze der MRN-Verteilung (2.4.3)) und $a_{I_{\rm car},\rm car} = 0\,\mu{\rm m}$ (Ruß vollständig verbrannt) gewählt wurde. Mit wachsendem i verringert sich folglich der Radius der Rußpartikel. Der Ratenterm für die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs ist dann entsprechend Glg. (2.5.20)

$$\frac{R_{i,\rm car}}{n} = \frac{c_{i-1,\rm car}}{\tau_{i-1,\rm car}} - \frac{c_{i,\rm car}}{\tau_{i,\rm car}} \,. \qquad (2.5.22)$$

$\tau_{i,\rm car}$ stellt die charakteristische Zeitskala der Verbrennung des Kohlenstoffstaubs durch OH-Moleküle dar. Diese ist nach Glg. (2.5.10) gegeben ist durch

$$\tau_{i,\rm car} = \frac{a_{i+1,\rm car} - a_{i,\rm car}}{V_{0,\rm car} a_{\rm ox} n_{\rm OH}} \sqrt{\frac{2\pi m_{\rm OH}}{k_{\rm B} T}} \,. \qquad (2.5.23)$$

Der Ratenterm (2.5.22) ist in dieser Form nur für die Niveaus $i = 2 \ldots (I_{\rm car} - 1)$ gültig. Im Niveau $i = 1$ kann kein Zuwachs aus einem tieferliegenden Niveau erfolgen, weil Staubteilchen größer als $a_{1,\rm car}$ im Modell nicht betrachtet werden. In diesem Fall ist der erste Term der rechten Seite des Ratenterms (2.5.22) zu ignorieren. Im Niveau $i = I_{\rm car}$ dagegen ist ein Verlust in ein höherliegendes Niveau nicht möglich, da der Kohlenstoffstaub vollständig verbrannt ist. In diesem Fall ist der zweite Term der rechten Seite des Ratenterms (2.5.22) zu ignorieren.

Mittlerer Kristallisationsgrad Der mittlere Kristallisationsgrad von Forsterit bzw. Enstatit ist definiert durch

$$f_{\rm cry,for} = \sum_{i=1}^{I_{\rm sil}} x_{i,\rm cry} c_{i,\rm for} \qquad\qquad f_{\rm cry,ens} = \sum_{i=1}^{I_{\rm sil}} x_{i,\rm cry} c_{i,\rm ens} \,. \qquad (2.5.24)$$

Hier stellen $c_{i,\rm for}$ und $c_{i,\rm ens}$ die Konzentationen von Forsterit- bzw. Enstatit-Staubteilchen mit Kristallisationsgrad $x_{i,\rm cry}$ dar. Die Konzentrationen $c_{i,\rm for}$ und $c_{i,\rm ens}$ werden durch die Lösung eines Satzes von für Forsterit bzw. Enstatit jeweils $I_{\rm sil}$ gekoppelten Transport-Reaktions-Gleichungen (2.5.16) bestimmt. Jede der $I_{\rm sil}$ Transport-Reaktions-Gleichungen für den Silikatstaub steht dabei für ein gesondertes Kristallisationsniveau. Das Verfahren der Lösung der gekoppelten Transport-Reaktions-Gleichungen wird in Abschnitt 2.7.4 bzw. Anhang B.3 beschrieben.

Die mittels Glg. (2.5.24) bestimmten mittleren Kristallisationsgrade von Forsterit bzw. Enstatit gehen in die Gleichungen für die Berechnung der Opazität der Silikate (2.4.12) und (2.4.13) und damit in Glg. (2.4.11) für die Gesamtopazität des Staubes ein. Da Silikat einer der Hauptabsorber in protoplanetaren Scheiben darstellt, beeinflußt der Kristallisationsgrad des Silikats folglich maßgeblich die radiale Struktur (Temperatur, Dichte etc.) der Scheibe.

Der mittlere Kristallisationsgrad wird im Folgenden vereinfacht als Kristallisationsgrad bezeichnet. Falls der tatsächliche Kristallisationsgrad $x_{\rm cry}$ (Glg. (2.5.1)) gemeint sein sollte, wird besonders darauf hingewiesen.

Kondensationsgrad von Kohlenstoff Der Kondensationsgrad von Kohlenstoff in Kohlenstoffstaub ist bestimmt durch (Gail 2001)

$$f_{\rm car} = \frac{1}{V_{0,\rm car}\epsilon_{\rm C}} \sum_{i=1}^{I_{\rm car}-1} \frac{4\pi}{3} a_i^3 \, c_{i,\rm car} \; . \tag{2.5.25}$$

$V_{0,\rm car}$ ist durch Glg. (2.5.8) gegeben. $c_{i,\rm car}$ stellt die Konzentration von Kohlenstoffstaub mit Teilchenradius a_i dar. Die Konzentrationen $c_{i,\rm car}$ werden durch die Lösung eines Satzes von $I_{\rm car}$ gekoppelten Transport-Reaktions-Gleichungen (2.5.16) bestimmt. Jede der $I_{\rm car}$ Transport-Reaktions-Gleichungen für den Kohlenstoffstaub steht dabei für einen gesonderten Teilchenradius.

Der mittels Glg. (2.5.25) berechnete Kondensationsgrad von Kohlenstoff in Ruß geht in Glg. (2.4.11) für die Bestimmung der Gesamtopazität des Staubes ein. Da Ruß ebenso wie Silikat einer der Hauptabsorber in protoplanetaren Scheiben ist, bestimmt $f_{\rm car}$ die radiale Struktur der Scheibe ebenfalls maßgeblich mit.

Normierung der Konzentration Der Definition der Konzentration (2.5.12) zufolge gilt

$$\sum_i c_{i,j} = 1 \qquad \forall \quad \text{Species } j \; . \tag{2.5.26}$$

Die Normierung der Konzentrationen $c_{i,j}$ einer Species j in unterschiedlichen Erscheinungsformen i muß während der Modellrechnung immer erhalten bleiben.

2.6 Die radialen Scheibengleichungen im Überblick

Die Gleichungen für die Berechnung der radialen Struktur der protoplanetaren Scheibe in der Einzonennäherung sind in diesem Abschnitt der Übersichtlichkeit halber nochmals aufgeführt. Die Scheibengleichungen in der Reihenfolge ihrer Lösung im Modell sind:

Zeitliche Entwicklung der Flächendichte (siehe Glg. (2.2.3)):

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = \frac{3}{r}\frac{\partial}{\partial r}\sqrt{r}\frac{\partial}{\partial r}\nu\Sigma\sqrt{r} \; . \tag{2.6.1}$$

Keplersche Winkelgeschwindigkeit (siehe Glg. (2.2.2)):

$$\Omega = \sqrt{\frac{GM_*}{r^3}} \; . \tag{2.6.2}$$

Viskosität nach dem β-Ansatz (siehe Glg. (2.2.11)):

$$\nu_\beta = \beta \, r^2 \Omega \; . \tag{2.6.3}$$

Isotherme Schallgeschwindigkeit (siehe Glg. (2.2.15)):

$$c_{\rm s} = \sqrt{\frac{k_{\rm B}T_{\rm c}}{\mu m_{\rm H}}} \; . \tag{2.6.4}$$

Druckskalenhöhe bei Berücksichtigung der Keplerschen Selbstgravitation der Scheibe (siehe Glg. (2.2.20)):

$$h_\mathrm{s} = \frac{2\pi G\Sigma}{\Omega^2}\left[\sqrt{1+\left(\frac{c_\mathrm{s}\Omega}{2\pi G\Sigma}\right)^2} - 1\right] . \tag{2.6.5}$$

Vertikal gemittelte Dichte (siehe Glg. (2.2.21)):

$$\rho_\mathrm{m} = \frac{\Sigma}{2h_\mathrm{s}} . \tag{2.6.6}$$

Mittleres Molekulargewicht (siehe Glg. (2.3.35)):

$$\mu = \frac{\rho_\mathrm{m} k_\mathrm{B} T_\mathrm{c}}{m_\mathrm{H}(p_\mathrm{H} + p_{\mathrm{H}_2} + p_\mathrm{He})} , \tag{2.6.7}$$

wobei die Berechnung der Partialdrücke p_Y der unterschiedlichen Gasspezies Y in Abschnitt 2.3 beschrieben ist.

Rosseland- und Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität der Silikate, des Staubs und der Scheibenmaterie insgesamt wird bestimmt durch die Ausdrücke (vergl. Abschnitt 2.4):

$$\kappa_\mathrm{R/P,for} = f_\mathrm{cry,for}\kappa_\mathrm{R/P,for,cry} + (1 - f_\mathrm{cry,for})\,\kappa_\mathrm{R/P,sil,am} , \tag{2.6.8}$$

$$\kappa_\mathrm{R/P,ens} = f_\mathrm{cry,ens}\kappa_\mathrm{R/P,ens,cry} + (1 - f_\mathrm{cry,ens})\,\kappa_\mathrm{R/P,sil,am} , \tag{2.6.9}$$

$$\kappa_\mathrm{R/P,dust} = f_\mathrm{car}\kappa_\mathrm{R/P,car} + f_\mathrm{ens}\kappa_\mathrm{R/P,ens} + f_\mathrm{for}\kappa_\mathrm{R/P,for} + f_\mathrm{iro}\kappa_\mathrm{R/P,iro} + f_\mathrm{cor}\kappa_\mathrm{R/P,cor} , \tag{2.6.10}$$

$$\kappa_\mathrm{R/P} = f_\mathrm{ice}\kappa_\mathrm{R/P,ice} + (1 - f_\mathrm{ice})\,\kappa_\mathrm{R/P,dust} + (1 - f_\mathrm{cor})\,\kappa_\mathrm{mol} . \tag{2.6.11}$$

Die Approximationsformeln zur Berechnung der $\kappa_\mathrm{R/P,Z}$ der Kondensate Z sowie von κ_mol für die Moleküle sind in Anhang A.2 angegeben. Wie der Kondensationsgrad f_Z des jeweiligen Schlüsselelements des Kondensats Z berechnet wird, ist in Abschnitt 2.3.2 dargestellt (mit Ausnahme von f_car, siehe Glg. (2.6.19)).

Rosselandsche und Plancksche vertikale optische Tiefe (siehe Glg. (2.2.28)):

$$\tau_\mathrm{R/P} = \frac{1}{2}\Sigma\,\kappa_\mathrm{R/P} . \tag{2.6.12}$$

Viskose Dissipationsrate (siehe Glg. (2.2.22)):

$$\dot{E}_\nu = \frac{9}{8}\,\Omega^2\nu\Sigma . \tag{2.6.13}$$

Effektivtemperatur der Scheiben-Oberfläche (siehe Glg. (2.2.24)):

$$\sigma T_\mathrm{eff}^4 = \left(1 + \frac{1}{4\tau_\mathrm{P}}\right)\dot{E}_\nu + \sigma T_\mathrm{cloud}^4 . \tag{2.6.14}$$

Temperatur in der Scheiben-Mittelebene (siehe Glg. (2.2.26)):

$$\sigma T_{\rm c}^4 = \left(\frac{3}{4}\tau_{\rm R} + \frac{1}{4\tau_{\rm P}}\right)\dot{E}_\nu + \sigma T_{\rm cloud}^4 \ . \tag{2.6.15}$$

Radiale Driftgeschwindigkeit (siehe Glg. (2.2.5)):

$$v_r = \frac{3}{\sqrt{r}\Sigma}\frac{\partial}{\partial r}\,\nu\Sigma\sqrt{r} \ . \tag{2.6.16}$$

Satz von Transport-Reaktions-Gleichungen (siehe Glg. (2.5.16)):

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v_r\frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} = \frac{1}{rn}\frac{\partial}{\partial r}\,rnD\,\frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} + \frac{R_{i,j}}{n} \ . \tag{2.6.17}$$

Durch die Lösung des Satzes von Gleichungen (2.6.17) erhält man die Konzentrationen $c_{i,\rm for}$ und $c_{i,\rm ens}$ von Forsterit- bzw. Enstatit-Staubteilchen mit unterschiedlichem Kristallisationsgrad $x_{i,\rm cry}$, $i = 1 \ldots I_{\rm sil}$, sowie die Konzentrationen $c_{i,\rm car}$ von Kohlenstoff-Staubteilchen mit unterschiedlichem Radius $a_{i,\rm car}$, $i = 1 \ldots I_{\rm car}$. Die Ratenterme $R_{i,\rm for}$ und $R_{i,\rm ens}$ für das Annealing der Silikate sowie der Ratenterm $R_{i,\rm car}$ für die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs sind in Abschnitt 2.5.3 angegeben. Für den Diffusionskoeffizienten wird vereinfachend $D = \nu$ gesetzt, wie in Abschnitt 2.5.3 beschrieben.

Kristallisationsgrad von Forsterit und Enstatit (siehe Glg. (2.5.24)):

$$f_{\rm cry,for} = \sum_{i=1}^{I_{\rm sil}} x_{i,\rm cry} c_{i,\rm for} \qquad\qquad f_{\rm cry,ens} = \sum_{i=1}^{I_{\rm sil}} x_{i,\rm cry} c_{i,\rm ens} \ . \tag{2.6.18}$$

Kondensationsgrad von Kohlenstoff (siehe Glg. (2.5.25)):

$$f_{\rm car} = \frac{1}{V_{0,\rm car}\epsilon_{\rm C}} \sum_{i=1}^{I_{\rm car}-1} \frac{4\pi}{3} a_i^3\, c_{i,\rm car} \ . \tag{2.6.19}$$

Massenakkretionsrate (siehe Glg. (2.2.4)):

$$\dot{M}(r,t) = 2\pi r\Sigma\, v_r \ . \tag{2.6.20}$$

Massenakkretion des Sterns (siehe Glg. (2.2.6)):

$$M_*(t) = M_*(0) - \int_0^t \dot{M}(r_{\rm in}, t')\, dt' \ . \tag{2.6.21}$$

Im Rahmen des Modells bilden Gleichungen (2.6.1) – (2.6.21) den Satz der radialen Aufbaugleichungen der Scheibe in der Einzonennäherung. Für das Verfahren der Lösung des Satzes der radialen Aufbaugleichungen der Scheibe wird auf Abschnitt 2.7 verwiesen.

Tabelle 2.7.1: Parameter für das Standardmodell der Scheibe.

Anfangsmasse des Sterns	$M_{*,0}$	$1\,M_\odot$
Effektivtemperatur des Sterns	T_*	$4\,500\,\mathrm{K}$
Leuchtkraft des Sterns	L_*	$5\,L_\odot$
Sternradius	R_*	$3.688\,R_\odot$
Innenrand der Scheibe	r_in	$5\,R_*$
Außenrand der Scheibe	r_out	$200\,\mathrm{AU}$
Anfangsmasse der Scheibe	$M_{\mathrm{disk},0}$	$0.2\,M_\odot$
Drehimpuls der Scheibe	$J_{\mathrm{disk},0}$	$10^{53}\,\mathrm{g\,cm^2\,s^{-1}}$
Temperatur der Molekülwolke	T_cloud	$20\,\mathrm{K}$
Viskositätsparameter	β	10^{-5}

Selbstgravitation und Wahl des Viskositäts-Ansatzes Im radialen Modell ist die Keplersche Selbstgravitation der Scheibe berücksichtigt (Glg. (2.6.5)). Bei der Wahl des Ansatzes für die Viskosität wurde der β-Ansatz gegenüber dem α-Ansatz bevorzugt (Glg. (2.6.3)). Der Grund hierfür ist, daß in Modellen mit α-Viskosität, in denen die Keplersche Selbstgravitation der Scheibe berücksichtigt wird, die Scheibe in Bereichen, in denen die Selbstgravitation der Scheibe gegenüber der Gravitationsanziehung des Sterns dominiert, unphysikalisch radial isotherm wird (Duschl et al. 2000). Im Gegensatz zur α-Viskosität ist die β-Viskosität unabhängig von thermodynamischen Größen. Folglich wird bei Verwendung der β-Viskosität das Auftreten einer unphysikalisch radial konstanten Temperatur bei Berücksichtigung der Keplerschen Selbstgravitation der Scheibe vermieden.

2.7 Numerische Behandlung

In diesem Abschnitt wird dargestellt, wie der Satzes von Gleichungen (2.6.1) – (2.6.21) für die radiale Struktur der Scheibe gelöst wird. Dies beinhaltet die Angabe von Modellparametern, die Diskretisierung der Gleichungen, die Angabe von Anfangs- und Randbedingungen und das numerische Lösungsverfahren.

2.7.1 Modellparameter

Die im Scheibenmodell verwendeten Parameter sind in Tab. 2.7.1 zusammengestellt. Im Folgenden wird die Wahl der einzelnen Parameter begründet.

Eigenschaften des Sterns Es wird ein Stern mit der Masse der Sonne angenommen. Die für die Effektivtemperatur und die Leuchtkraft des Sterns gewählten Werte sind typisch für T Tauri-Sterne mit solarer Masse. Der Sternradius ist über die Temperatur-Leuchtkraft-Beziehung festgelegt:

$$L_* = 4\pi R_*^2\,\sigma T_*^4 \tag{2.7.1}$$

Scheibenränder Die Lage des Innenrands der Scheibe im Modell ist auf 5 Sternradien $\equiv 0.096\,\mathrm{AU}$ festgelegt. Diese Wahl ist relativ willkürlich und deutet die Unkenntnis über die Struktur des Übergangsbereichs an, in dem der Massenfluß von der Scheibe auf den Stern stattfindet. Die Übergangsschicht wird im Rahmen dieser Arbeit nicht modelliert.

Der Scheiben-Außenrand wurde wie folgt festgelegt: Anhand Abb. 2.2.1 für die viskose Zeitskala der Scheibe läßt sich erkennen, daß innerhalb der typischen Lebensdauer der Scheiben von $10^6 \ldots 10^7\,\mathrm{a}$ (Haisch et al. 2001) die Scheibenbereiche außerhalb von $\sim 100\,\mathrm{AU}$ völlig unbeeinflußt vom Zustand der chemisch aktiven inneren Bereiche der Scheibe bleiben. Die äußersten Scheibenregionen entwickeln sich folglich dynamisch entkoppelt vom inneren Scheibenbereich. Es macht daher keinen Sinn, die zeitliche Entwicklung der äußersten Regionen der Scheiben im Rahmen dieses Modells zu verfolgen. Der äußere Rand der Scheibe wird auf $200\,\mathrm{AU}$ festgelegt.

Masse und Drehimpuls der Scheibe Aus Fern-Infrarot- und Submillimeter-Beobachtungen von protoplanetaren Scheiben leitet man Scheibenmassen von $\sim 0.1 \ldots 0.001\,\mathrm{M}_\odot$ ab (Beckwith & Sargent 1993). Der Wert von $M_{\mathrm{disk}} = 0.2\,M_\odot$, der im Modell für die Anfangsmasse der Scheibe angenommen wird (Tab. 2.7.1), liegt also eher am oberen Ende des beobachteten Massenspektrums. Allerdings verlieren die Scheiben infolge des Akkretionsprozesses im Laufe der Scheibenentwicklung einen Teil ihrer Masse an den Stern. Innerhalb von $10^6\,\mathrm{a}$ büßt eine protoplanetare Scheibe auf diese Weise etwa die Hälfte ihrer Masse ein (Ruden & Pollack 1991). Der Akkretionsprozeß bietet somit eine Erklärung für die Scheiben mit Massen am unteren Ende der Skala von Beckwith & Sargent 1993. Die Wahl des Wertes von $0.2\,M_\odot$ für die *anfängliche* Masse der Scheibe im Modell ist damit gerechtfertigt.

Über den Drehimpuls von protoplanetaren Scheiben ist wenig bekannt. Anhand der Untersuchung der Rotationsgeschwindigkeiten von Molekülwolkenkernen, aus denen die Scheiben durch Kollaps hervorgehen, leitet man Drehimpulse der Wolkenkerne von etwa $10^{52 \ldots 53}\,\mathrm{g\,cm^2\,s^{-1}}$ ab (Nakamoto & Nakagawa 1995; Stepinski 1998). Für den anfänglichen Drehimpuls der Scheibe $J_{\mathrm{disk},0}$ wird im Modell $10^{53}\,\mathrm{g\,cm^2\,s^{-1}}$ gewählt.

Temperatur der Molekülwolke Die Temperatur T_{cloud} der Molekülwolke im Modell wird auf $20\,\mathrm{K}$ gesetzt. Die Wahl des Wertes von T_{cloud} hat nur geringen Einfluß auf die Ergebnisse der Modellrechnungen.

Viskositätsparameter Aus Laborexperimenten mit Scherströmungen ähnlich der in Akkretionsscheiben, wie z.B. die Experimente eines viskosen Mediums zwischen zwei koaxial rotierenden Zylindern von Wendt (1933) und Taylor (1936a,b), leitet man im Grenzfall großer Abstände der Zylinder kritische Reynolds-Zahlen im Bereich von $\Re_{\mathrm{crit}} \sim 10^5 \ldots 10^6$ ab (Richard & Zahn 1999). Interessanterweise wird bei entsprechender Wahl von β ($\beta \sim 10^{-5} \ldots 10^{-6}$; $\beta = \Re_{\mathrm{crit}}^{-1}$ (siehe Abschnitt 2.2.2)) in Scheibensimulationen die beobachtete Lebensdauer von protoplanetaren Scheiben reproduziert (z.B. Wehrstedt & Gail 2003). Der Grenzfall kleiner Abstände der Zylinder, welcher von Duschl et al. (2000) hinsichtlich der Erzeugung von Turbulenz in Scheiben bevorzugt wird, liefert im Gegensatz dazu kritische Reynolds-Zahlen, die um drei Größenordnungen kleiner sind, d.h. $\beta \sim 10^{-2} \ldots 10^{-3}$. Da bei derart großen β im Vergleich zur Beobachtung deutlich zu kurze Lebensdauern der protoplanetaren Scheiben resultieren (siehe viskose Zeitskala (2.2.12)), wird im Rahmen dieser Arbeit $\beta = 10^{-5}$ gewählt.

2.7.2 Räumliche und zeitliche Diskretisierung

Der Satz von Gleichungen (2.6.1) – (2.6.21) stellt ein gekoppeltes, nicht-lineares, zeitabhängiges System von Gleichungen bzw. Differentialgleichungen dar. Die allgemeine Lösung läßt sich nicht auf analytischem Wege finden, sondern muß auf numerischem Wege erfolgen.

Orts-Diskretisierung Zu diesem Zweck wird die radiale Koordinate r in K diskrete Werte r_k, $k = 1 \ldots K$, aufgeteilt und das Gleichungssystem (2.6.1) – (2.6.21) an jedem radialen Punkt r_k gelöst. Das radiale Gitter im Modell ist logarithmisch äquidistant, d.h. es verdichtet sich zu kleineren Werten von r hin.

Es wurde eine radiale Gitterpunktdichte von 100 Gitterpunkten pro Dekade für die Modellrechnungen gewählt. Dies entspricht bei gegebenem Innen- und Außenrand (Tab. 2.7.1) einer Gesamtzahl von $K = 332$ radialen Gitterpunkten. Testrechnungen mit größerer und kleinerer Zahl von radialen Gitterpunkten haben gezeigt, daß die Wahl von 100 Gitterpunkten pro Dekade einen angemessenen Kompromiß zwischen Rechengeschwindigkeit und Genauigkeit der Lösung darstellt.

Zeit-Diskretisierung Die Zeit-Koordinate t wird in diskrete Werte t^n unterteilt. Die Zeitschrittweite des momentanen Zeitschritts n ist durch $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ gegeben. Die Startzeit der Modellrechnungen wird auf $t^0 = 0$ festgelegt. Der Abbruch der Modellrechnungen erfolgt bei $t = 10^6$ a (siehe Diskussion zur Koagulation in Abschnitt 2.4.1).

2.7.3 Anfangs- und Randbedingungen

Die Lösung der Differentialgleichungen für die Flächendichte Σ (2.6.1) und für die Tracer-Konzentrationen $c_{i,j}$ (2.6.17) erfordert die Angabe von Anfangs- und Randbedingungen.

Anfangsbedingung für $\boldsymbol{\Sigma}$ Der radiale Verlauf der Flächendichte zum Zeitpunkt $t = 0$ wird aus einem stationären Modell der Scheibe gewonnen, d.h. der Satz von Scheibengleichungen (2.6.1) – (2.6.21) wird unter den Bedingungen $\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = 0$ bzw. $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} = 0$ gelöst. Die stationäre Lösung der Gleichung der Flächendichte (2.6.1) ist durch Glg. (2.2.9) gegeben. Um das anfängliche $\Sigma(r)$ zu bestimmen, ist folglich die Angabe der Massenakkretionsrate $\dot{M}$ in der Scheibe zu Beginn der Scheibenentwicklung erforderlich.

Über die Massenakkretionsrate in der frühen Phase der Entwicklung von protoplanetaren Scheiben ist allerdings wenig bekannt. Zwar leitet man aus der Breite der Ionisationslinien des Wasserstoff im Ultravioletten (UV) (vorwiegend der Hα-Linie) in T Tauri-Sternen Massenakkretionsraten $\dot{M}$ in der Größenordnung $10^{-7 \ldots -9}\,\mathrm{M}_\odot\,\mathrm{a}^{-1}$ ab (z.B. Hartmann 2000). Dies sind jedoch Werte der Akkretionsrate am Innenrand der Scheibe, wo die Scheibenmaterie beim Akkretionsprozeß auf den Stern stürzt. Eine Aussage über den radialen Verlauf von $\dot{M}$ in der Scheibe kann damit nicht gemacht werden.

Im Gegensatz zur Massenakkretionsrate sind globale Scheibenparameter wie die Masse und der Drehimpuls der Scheibe geeigneter, um die Anfangsbedingungen der Scheibe festzulegen. Für die gegebenen Werte von $M_{\mathrm{disk},0}$ und $J_{\mathrm{disk},0}$ (siehe Tab. 2.7.1) wird nun das radiale Profil der Massenakkretionsrate des stationären Anfangsmodell der Scheibe wie folgt bestimmt:

Zunächst werden Startwerte für die Akkretionsraten am Innen- und Außenrand der Scheibe, $\dot{M}_{\rm in}$ bzw. $\dot{M}_{\rm out}$, vorgegeben. Der radiale Verlauf der Akkretionsrate wird daraufhin bestimmt aus der fermiartigen Verteilung

$$\dot{M}(r) = \begin{cases} \dot{M}_{\rm in} & : \quad r < r_{\rm a} \\ \dot{M}_{\rm in} \left(\dfrac{\dot{M}_{\rm out}}{\dot{M}_{\rm in}} \right)^{\frac{r_{\rm a}^2 - r^2}{r_{\rm a}^2 - r_{\rm b}^2}} & : \quad r_{\rm a} < r < r_{\rm b} \\ \dot{M}_{\rm out} & : \quad r > r_{\rm b}\ , \end{cases} \tag{2.7.2}$$

wobei $r_{\rm a} = 5\,\mathrm{AU}$ und $r_{\rm b} = 50\,\mathrm{AU}$ im Modell gesetzt sind. Das auf diese Weise ermittelte $\dot{M}(r)$ liefert mittels der stationären Gleichung (2.6.1) den radialen Verlauf der Flächendichte $\Sigma(r)$. Aus Glgen. (2.2.7) und Glg. (2.2.8) wird mittels $\Sigma(r)$ die Scheibenmasse $M_{\rm disk,0}$ und der Scheibendrehimpuls $J_{\rm disk,0}$ bestimmt. Falls die Werte von $M_{\rm disk,0}$ bzw. $J_{\rm disk,0}$ nicht mit den gewünschten Werten (Tab. 2.7.1) übereinstimmen, wird die obige Prozedur mit neuen Werten für $\dot{M}_{\rm in}$ und $\dot{M}_{\rm out}$ wiederholt. Dies geschieht mittels eines Newton-Raphson-Verfahrens so lange, bis $M_{\rm disk,0}$ und $J_{\rm disk,0}$ mit den gewünschten Werten bis zu einer Genauigkeit von 10^{-9} übereinstimmen. Die Lösung für $M_{\rm disk,0}$ und $J_{\rm disk,0}$ liefert $\dot{M}_{\rm in}$ und $\dot{M}_{\rm out}$ und damit nach Glg. (2.7.2) $\dot{M}(r)$. Über die stationäre Gleichung (2.6.1) erhält man schließlich die Anfangsbedingung für die Flächendichte $\Sigma(r)$.

Anfangsbedingungen für die $c_{i,j}$ Die Anfangsbedingungen für die Konzentrationen $c_{i,j}$ für die Lösung der Transport-Reaktions-Gleichungen (2.6.17) sind wie folgt gewählt:

Das Silikat in der Scheibe soll zu Beginn der Modellrechnung als unprozessierter amorpher ISM-Staub vorliegen, d.h. für die Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit soll $f_{\rm cry,for} = f_{\rm cry,ens} = 0$ überall in der Scheibe gelten. Dies erscheint als eine vernünftige Wahl, falls das amorphe ISM-Silikat vor Ankunft in der protoplanetaren Scheibe nicht bereits einem Annealing-Ereignis ausgesetzt war. Wie Harker & Desch (2002) zeigen konnten, kann Staub durch kurzzeitiges Aufheizen während der Passage der Akkretions-Stoßfront ober- und unterhalb der Scheibe kristallisiert werden. In den Außenbereichen der Scheibe ist der Akkretions-Stoß allerdings zu schwach, um die Kristallisation der Silikat-Teilchen hervorzurufen. In den Innenbereichen der Scheibe, wo der Akkretions-Stoß dazu stark genug ist, ist die Scheibe in der Mittelebene jedoch ohnehin heiß genug, um die Silikate – verglichen mit der Entwicklungszeit von Scheiben – nahezu instantan zu kristallisieren. Es wird folglich zu Beginn der Rechnung rein amorphes Silikat in der Scheibe angenommen. Unter dieser Voraussetzung gilt für die Konzentrationen der Silikate bei $t = 0$

$$c_{i,\rm for} = c_{i,\rm ens} = \begin{cases} 1 & : \quad i = 1 \\ 0 & : \quad \text{sonst} \end{cases}\ , \tag{2.7.3}$$

d.h. ausschließlich das Niveau $i = 1$ mit Kristallisationsgrad Null ist besetzt.

Der Kohlenstoffstaub soll zu Beginn der Scheibenentwicklung ebenfalls in Form von ISM-Staub vorliegen. Nach dem Modell Mathis et al. (1977) sind im interstellaren Medium $60\,\%$ des Kohlenstoffs im Kohlenstoffstaub gebunden. Für den anfänglichen Kondensationsgrad von C in Ruß gilt folglich $f_{\rm car,0} = 0.6$. Die restlichen $40\,\%$ des Kohlenstoffs befinden sich in der Gasphase, vorwiegend im CO-Molekül. Für die anfängliche Größenverteilung des Kohlenstoffstaubs $f(a_{\rm car})$ wird die MRN-Größenverteilung (2.4.3) angenommen.

Unter diesen Voraussetzungen gilt für die Konzentration des Kohlenstoffstaubs zu Anfang

$$c_{i,\mathrm{car}} = \begin{cases} f_{\mathrm{car},0} \cdot f(a_{i,\mathrm{car}}) \cdot (a_{i,\mathrm{car}} - a_{i+1,\mathrm{car}}) & : \quad i = 1 \ldots (I_{\mathrm{car}} - 1) \\ 1 - \sum\limits_{i=1}^{I_{\mathrm{car}}-1} c_{i,\mathrm{car}} & : \quad i = I_{\mathrm{car}} \end{cases} . \tag{2.7.4}$$

Im Niveau $i = I_{\mathrm{car}}$ mit $a_{I_{\mathrm{car}},\mathrm{car}} = 0$ ist der Kohlenstoffstaub vollständig verbrannt, d.h. der Kohlenstoff befindet sich in der Gasphase.

Die $c_{i,\mathrm{car}}$ in Glg. (2.7.4) werden als Startwert für die Berechnung des stationären Scheibenmodells ($\frac{\partial \Sigma}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} = 0$) verwendet. Die Lösung des stationären Scheibenmodells liefert das radiale Profil der Flächendichte $\Sigma(r)$ sowie die radialabhängigen Konzentrationen $c_{i,\mathrm{car}}$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Die Anfangsbedingungen für die Konzentrationen $c_{i,\mathrm{for}}$ bzw. $c_{i,\mathrm{ens}}$ sind, wie bereits beschrieben, durch Glg. (2.7.3) gegeben.

Randbedingungen Für die Konzentrationen $c_{i,j}$ sind am Innenrand wie am Außenrand homogene von Neumann-Randbedingungen gewählt, d.h. die radialen Ableitungen der Konzentrationen $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial r}$ an den Rändern sind identisch Null.

Die Flächendichte Σ am Außenrand wurde gleich Null gesetzt. Dies ist eine vernünftige Wahl, da Σ in protoplanetaren Scheiben i. A. eine abfallende Funktion des Radius' ist und $\Sigma \to 0$ für $r \to \infty$ gilt.

Für die Flächendichte am Innenrand wurde die sogenannte *quasistationäre Randbedingung* gewählt (Wehrstedt & Gail 2003). Die quasistationäre Randbedingung am Innenrand ersetzt die in den meisten Modellen verwendete *no torque*-Randbedingung, bei der wie am Außenrand $\Sigma = 0$ gesetzt wird.

Bei der no torque-Randbedingung bleibt der Drehimpuls in der Scheibe erhalten. Ein gravierender Nachteil der no torque-Randbedingung ist allerdings der unphysikalische Abfall der Flächendichte bei zeitabhängigen Scheibenmodellen in der Nähe des Innenrandes (z.B. Ruden & Pollack 1991; Wehrstedt & Gail 2002). Die Information $\Sigma = 0$ am Innenrand wird im Laufe der Zeit im Scheibenmodell sozusagen radial nach außen getragen. Die Folge ist eine unphysikalische Struktur des inneren Scheibenbereichs, also des Bereichs der Scheibe, der chemisch am aktivsten ist.

Die quasistationäre Randbedingung vermeidet dieses Problem. Sie sorgt für einen glatten radialen Verlauf der Flächendichte am Innenrand bei nur geringfügig größerem Rechenaufwand. Die numerische Behandlung der quasistationären Randbedingung ist im Detail in Anhang B.1 beschrieben.

Es wurde überprüft, ob die quasistationäre Randbedingung die Erhaltung von Masse und Drehimpuls gewährleistet. Durch Testrechnungen konnte bestätigt werden, daß Masse und Drehimpuls bis zur vorgegebenen numerischen Genauigkeit erhalten bleiben.

2.7.4 Numerisches Lösungsverfahren

Es folgt die Beschreibung des numerischen Lösungsverfahrens für den Satz von gekoppelten, nicht-linearen Gleichungen (2.6.1) – (2.6.21) für die radiale Struktur der Scheibe. Das zugehörige Modellprogramm wurde in Fortran 77 geschrieben. Das Flußdiagramm des Modellprogramms ist in Abb. 2.7.1 dargestellt.

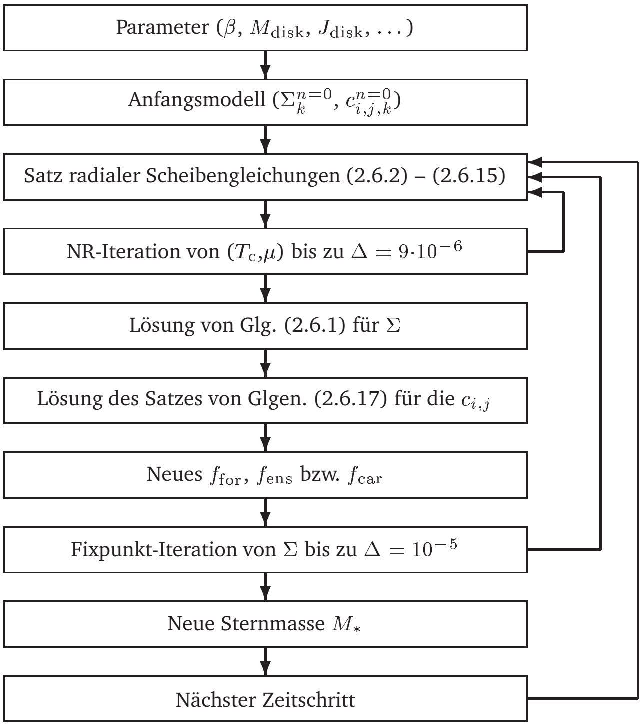


Abbildung 2.7.1: Flußdiagramm des Computerprogramms für das Scheibenmodell in der Einzonennäherung. Die Pfeile auf der rechten Seite des Diagramms kennzeichnen die Iterationsschleifen bzw. die Zeitschleife. Δ bezeichnet die Genauigkeit der Iteration. Für Details siehe Text.

Radiale Scheibengleichungen Nach der Vorgabe von Modellparametern (Tab. 2.7.1) und Festlegung der Anfangsbedingungen (siehe Abschnitt 2.7.3) wird innerhalb eines Zeitschritts zunächst das System von Gleichungen für den radialen Scheibenaufbau (2.6.2) – (2.6.15) gelöst. Dies geschieht mit Hilfe eines gekoppelten Newton-Raphson-Verfahrens in den Variablen $T_{\rm c}$ und μ bis zu einer Genauigkeit von $9{\cdot}10^{-6}$ (innere Schleife in Abb. 2.7.1). Ein Newton-Raphson-Verfahren in *einer* Variablen (z.B. $T_{\rm c}$) findet nicht in allen Fällen die Lösung des Gleichungssystems (2.6.2) – (2.6.15). Dies hat seinen Grund in der starken Kopplung zwischen der Zentral-Temperatur $T_{\rm c}$ und dem mittleren Molekulargewicht μ in Bereichen der Scheibe, in denen μ stark variiert. Daher ist ein gekoppeltes Newton-Raphson-Verfahren in $T_{\rm c}$ und μ notwendig.
Das Gleichungssystem (2.6.2) – (2.6.15) wird, beginnend am Außenrand ($k = K$) und fortschreitend bis zum Innenrand ($k = 1$), an jedem radialen Punkt k gelöst. Damit das Gleichungssystem (2.6.2) – (2.6.15) an jedem Gitterpunkt k gelöst werden kann, sind Startwerte für $T_{\rm c}$ und μ vorzugeben. Dafür werden die Werte der Variablen am Gitterpunkt $k + 1$ verwendet. Am Außenrand werden $T_{\rm c} = T_{\rm cloud}$ (siehe Tab. 2.7.1) und $\mu = \frac{7}{3}$ als Startwerte vorgegeben.

Lösung der Differentialgleichung für $\boldsymbol{\Sigma}$ Die Differentialgleichung für die Flächendichte Σ (Glg. (2.6.1)) stellt eine parabolische Differentialgleichung dar. Die Diskretisierung der Gleichung und das Verfahren der Lösung ist in Anhang B.2 beschrieben. Das Verfahren der Lösung der Flächendichte-Gleichung ist voll implizit.

Lösung des Satzes von Transport-Reaktions-Gleichungen Das System von gekoppelten Transport-Reaktions-Gleichungen für die Tracer-Konzentrationen $c_{i,j}$ (Glg. 2.6.17) wird ebenfalls mit Hilfe eines voll impliziten Verfahrens gelöst. Die Diskretisierung der Gleichungen und das Verfahren der Lösung ist in Anhang B.3 beschrieben.

Globale Lösung Die Lösung des Systems von Gleichungen (2.6.2) – (2.6.15) samt der Flächendichte-Gleichung (2.6.1) liefert die globale Temperatur-Dichte-Struktur der Scheibe. Damit sind jene physikalischen Größen festgelegt, die für die Lösung der Transport-Reaktions-Gleichungen (2.6.17) benötigt werden. Dies sind im Einzelnen die radiale Driftgeschwindigkeit v_r (Glg. (2.6.16)), die Teilchendichte n, der Diffusionskoeffizient D, die Temperatur T_c und die Teilchendichte von OH-Molekülen n_OH. Die Temperatur T_c wird für die Berechnung des Ratenterms für das Annealing der Silikate benötigt, die OH-Teilchendichte n_OH sowie die Temperatur T_c werden zur Berechnung des Ratenterms für die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs benötigt (siehe Abschnitt 2.5.4).

Die Lösung des Satzes von Transport-Reaktions-Gleichungen (2.6.17) für die Kristallisation der Silikate und die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs liefert die Werte für die Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit, $f_\mathrm{cry,for}$ bzw. $f_\mathrm{cry,ens}$ (Glg. (2.5.24)), sowie den Kondensationsgrad von C in Kohlenstoffstaub, f_car (Glg. (2.5.25)). Die Opazität der Scheibenmaterie, die maßgeblich die Scheibenstruktur bestimmt, ist abhängig von diesen Größen (siehe Glgen. (2.6.8) – (2.6.11)). Die Rückwirkung des Tracer-Transports auf die Scheibenstruktur erfordert folglich eine globale Iteration für die Berechnung des Scheibenaufbaus. Die globale Iteration erfolgt durch eine Fixpunkt-Iteration der Flächendichte bis auf eine Genauigkeit von 10^{-5} (mittlere Schleife in Abb. 2.7.1).

Da die Gleichung für die Flächendichte (2.6.1) und die Transport-Reaktions-Gleichungen (2.6.17) jeweils voll implizit gelöst werden, ist durch Ausführen der globalen Iteration das Verfahren der Lösung insgesamt implizit. Lediglich die Massenzunahme des Sterns durch Akkretion wird innerhalb jedes Zeitschritts nachträglich, d.h. explizit, berücksichtigt (Abb. 2.7.1). Die Massenzunahme des Sterns erfolgt allerdings auf der viskosen Zeitskala. Daher kann auf die Iteration der Sternmasse innerhalb eines Zeitschritts verzichtet werden.

Zeitschrittsteuerung Voll implizite Verfahren besitzen gegenüber expliziten Verfahren den Vorteil, daß keine Einschränkung für die Wahl der Zeitschrittweite Δt existiert. Das zu lösende Gleichungssystem (2.6.1) – (2.6.21) ist jedoch gekoppelt und stark nicht-linear. Um numerische Instabilität aufgrund der Kopplung der Gleichung zu verhindern, wird die maximale Zeitschrittweite auf $50\,\mathrm{a}$ begrenzt.

Die Entwicklung des Anfangsmodells hin zur asymptotischen Lösung erfordert zu Beginn der Modellrechnung die Wahl einer relativ kleinen Zeitschrittweite. Das anfängliche Δt im Modell ist auf $10^{-8}\,\mathrm{a}$ gesetzt. Wenn die Flächendichte Σ oder die Opazität κ zwischen zwei Zeitpunkten um mehr als $3{\cdot}10^{-3}$ variiert, wird Δt um $20\,\%$ herabgesetzt. Sofern dies nicht der Fall ist, wird Δt bei jedem fünften Zeitschritt um $5\,\%$ erhöht. Mit dieser Vorgehensweise vergrößert sich Δt im Laufe der Modellrechnung langsam genug, um die Entwicklung des Anfangsmodells hin zur asymptotischen Lösung zu ermöglichen. Die Zeitschrittweite erreicht ihren maximalen Wert von $50\,\mathrm{a}$ nach einigen $10\,000$ Jahren und wird danach nur noch selten kurzfristig durch die Zeitschrittsteuerung herabgesetzt, bis schließlich die Modellrechnung nach 1 Millionen Jahren abgebrochen wird.

Die CPU-Zeit auf einem P4 XEON $2.8\,\mathrm{GHz}$-Computer für ein typisches Scheibenmodell beträgt etwa 37 Minuten.

Tabelle 2.8.1: Modellrechnungen in der Einzonennäherung.

Modell	Beschreibung
1DA0	α-Scheibe mit no torque-Innenrandbedingung ($\alpha = 3 \cdot 10^{-3}$)
1DAS	α-Scheibe mit quasistationärer Innenrandbedingung (QSR) ($\alpha = 3 \cdot 10^{-3}$)
1DB0G	β-Scheibe mit QSR und ohne Selbstgravitation der Scheibe ($\beta = 10^{-5}$)
1DB0A	β-Scheibe mit QSR, mit Selbstgravitation der Scheibe und ohne Annealing
1DBS	β-Scheibe mit QSR und mit Selbstgravitation der Scheibe (Standardmodell)
1DBF	Modell 1DBS mit Metallizität $[\mathrm{Fe/H}] = -2.0$

2.8 Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von Modellrechnungen in der Einzonennäherung vorgestellt, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt worden sind. Die Ergebnisdiskussion beschränkt sich dabei auf die wesentlichen Sachverhalte, da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf die Beschreibung und Diskussion der Modellrechnungen mit 2-dimensionalem Tracer-Transport in Kapitel 4 gelegt werden soll. Für eine ausführlichere Darstellung und Diskussion der Ergebnisse von Scheibenmodellen in der Einzonennäherung, die den radialen Tracer-Transport berücksichtigen, sei auf die Arbeiten von Wehrstedt & Gail (2002) und (2003) verwiesen.

In Tab. 2.8.1 sind die in dieser Arbeit durchgeführten Modellrechnungen in der Einzonennäherung aufgelistet und kurz beschrieben. Die Ergebnisse dieser Modellrechnungen werden im Folgenden in der Reihenfolge diskutiert, wie sie sich aus der Tabelle ergibt.

2.8.1 Quasistationäre Innenrandbedingung

Zunächst wird der Einfluß der neuen quasistationären Innenrandbedingung auf die Scheibenstruktur getestet. Zu diesem Zweck werden zwei Modelle verglichen:

(1) Modell 1DA0 mit der no torque-Innenrandbedingung ($\Sigma = 0$).

(2) Modell 1DAS mit der quasistationären Innenrandbedingung.

Beide Modelle werden dabei mit der α-Viskosität gerechnet und die Selbstgravitation der Scheibe jeweils vernachlässigt, d.h. die Druckskalenhöhe der Scheibe wird nach Glg. (2.2.17) bestimmt. Das Anfangsmodell ist jeweils das des Standardmodells 1DBS, und es wurde in den Modellen jeweils $\alpha = 3 \cdot 10^{-3}$ gesetzt. Die Wahl des Wertes von α wird in Abschnitt 2.8.2 erläutert.

In Abb. 2.8.1 ist der radiale Verlauf (a) der Flächendichte Σ und (b) der Zentral-Temperatur T_{c} in den Modellen 1DAS (durchgezogene Linie) und 1DA0 (gestrichelte Linie) dargestellt.

Die Abbildung zeigt, daß die Scheibenstruktur des Modells mit der quasistationäre Innenrandbedingung gegenüber der Scheibenstruktur des Modells mit der unrealistischeren no torque-Innenrandbedingung deutlich verändert wird. Die Flächendichte im Modell 1DA0 ist z.B. nach 10^6 a bei 0.2 AU unphysikalisch um einen Faktor 2 verringert. Bei 1 AU beträgt dieser Faktor zum gleichen Zeitpunkt immerhin noch 1.2. Man beachte im Modell 1DAS auch den glatten Verlauf von Σ am Innenrand.

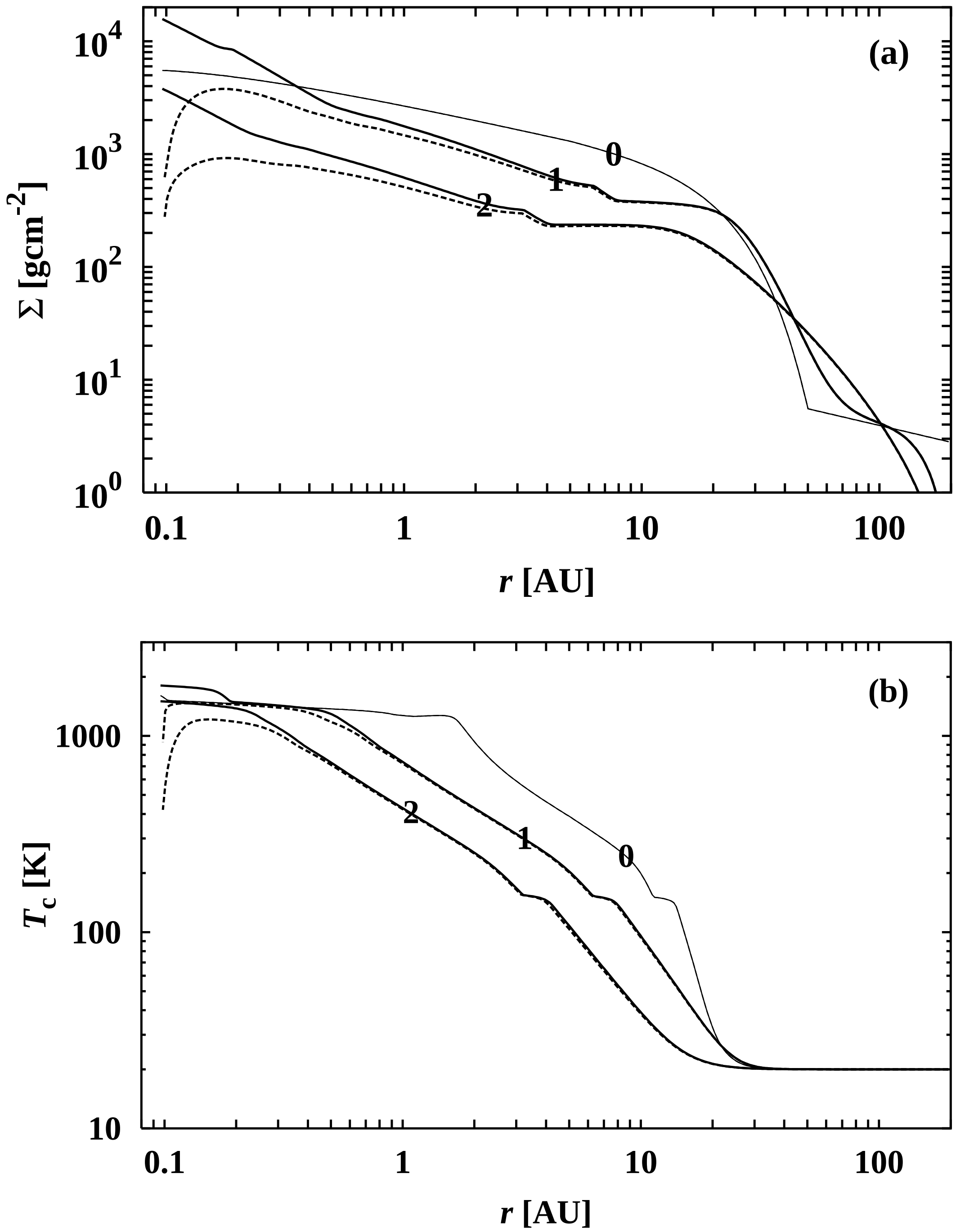


Abbildung 2.8.1: Radiale Struktur des Scheibenmodells mit α-Viskosität und der quasistationären Innenrandbedingung (Modell 1DAS; durchgezogene Linien) im Vergleich mit dem Scheibenmodell mit α-Viskosität und der no torque-Innenrandbedingung (Modell 1DA0; gestrichelte Linien) zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Flächendichte Σ. **(b)** Temperatur T_c in der Mittelebene.

Ähnlich ausgeprägt ist die Diskrepanz der Temperaturverläufe zwischen den Modellen 1DA0 und 1DAS (Abb. 2.8.1(b)). Nach 10^6 a und bei $0.2\,\mathrm{AU}$ betragen die Zentral-Temperaturen der Scheibe in den beiden Modellen $1\,380$ bzw. $1\,180\,\mathrm{K}$. Bei $1\,\mathrm{AU}$ sind die entsprechenden Werte 428 bzw. $423\,\mathrm{K}$, d.h. dort ist der Unterschied zwischen den Modellen nicht so ausgeprägt wie im Falle der Flächendichte.

Bisher wurde in zeitabhängigen Simulationen von Akkretionsscheiben in der Einzonennäherung die no torque-Innenrandbedingung angewendet (z.B. Lin & Papaloizou 1985; Ruden & Lin 1986; Ruden & Pollack 1991; Bell & Lin 1994; Wehrstedt & Gail 2002). Es wird jedoch für zukünftige Modellrechnungen empfohlen, die quasistationäre Innenrandbedingung zu verwenden. Dies erscheint fast unumgänglich, wenn chemische Entwicklungsrechnungen für die Scheibe durchgeführt werden sollen, denn chemische Prozesse reagieren sehr sensitiv selbst auf geringe Veränderungen der Temperatur. Die quasistationäre Innenrandbedingung, die die Scheibenstruktur nahe des Innenrands im Rahmen der Einzonennäherung realistisch wiedergibt, erfordert dabei nur einen geringfügigen Mehraufwand an Rechenzeit (siehe Anhang B.1).

In Abb. 2.8.1(a) läßt sich auch die zeitliche Verringerung von Σ durch den Akkretionsprozeß erkennen. Die Scheibenmassen am Ende der Simulation ($10^6\,\mathrm{a}$) betragen 0.107 bzw. $0.109\,M_\odot$ in den Modellen 1DA0 und 1DAS. Durch den Akkretionsprozeß wird die Scheibe mit der Zeit gekühlt. Die Temperatur am Innenrand zu Beginn und am Ende des Modells 1DAS beträgt $1\,606$ bzw. $1\,502\,\mathrm{K}$. Die relativ geringe Temperaturabnahme am Scheiben-Innenrand ist auf das Temperaturplateau zurückzuführen, das durch die Abnahme der Opazität im Bereich der Verdampfung der Hauptkondensate (Silikate, metallisches Eisen) hervorgerufen wird (vergl. Abb. 2.8.5). Das Temperaturplateau am Innenrand für Entwicklungszeiten $\lesssim 10^5\,\mathrm{a}$ ist auf die Verdampfung des Hochtemperatur-Kondensats Korund zurückzuführen. Darüber hinaus befindet sich ein Temperaturplateau bei $\sim 150\,\mathrm{K}$, das durch die Eissublimation hervorgerufen wird.

2.8.2 α versus β

Als nächstes werden folgende Modelle verglichen:

(1) Modell 1DAS mit der quasistationären Innenrandbedingung und α-Viskosität.

(2) Modell 1DB0G mit der quasistationären Innenrandbedingung und β-Viskosität.

In beiden Modellen ist die Selbstgravitation der Scheibe vernachlässigt. Als Werte für die Viskositätsparameter α und β wurden $3 \cdot 10^{-3}$ bzw. 10^{-5} gewählt. Diese Wahl ist so getroffen worden, daß die Entwicklungszeiten der Scheiben in den Modellen 1DAS und 1DB0G ungefähr gleich sind, d.h. die Scheiben in beiden Modellen bei Abbruch der Rechnungen annähernd gleich viel Masse an den Stern verloren haben.

Abb. 2.8.2 zeigt die Ergebnisse dieser Modellrechnungen, wobei wie in Abb. 2.8.1 (a) die Flächendichte und (b) die Zentral-Temperatur jeweils abhängig vom radialen Abstand aufgetragen sind.

Die Zentral-Temperaturen der Modelle 1DAS und 1DB0G (Abb. 2.8.2(b)) sind nur geringfügig voneinander verschieden. Dies liegt im wesentlichen in der Wahl der Viskositätsparameter in den beiden Modellen begründet, wodurch die Scheiben ähnlich heiß sind. Man beachte dabei, daß die radialen Temperaturverläufe der beiden Modelle zu Anfang voneinander abweichen, weil sich die Viskositätsparametrisierungen unterscheiden.

Im Gegensatz zu den Verläufen der Zentral-Temperatur unterscheiden sich die radialen Verläufe der Flächendichte der Modelle 1DAS und 1DB0G beträchtlich (Abb. 2.8.2(a)).

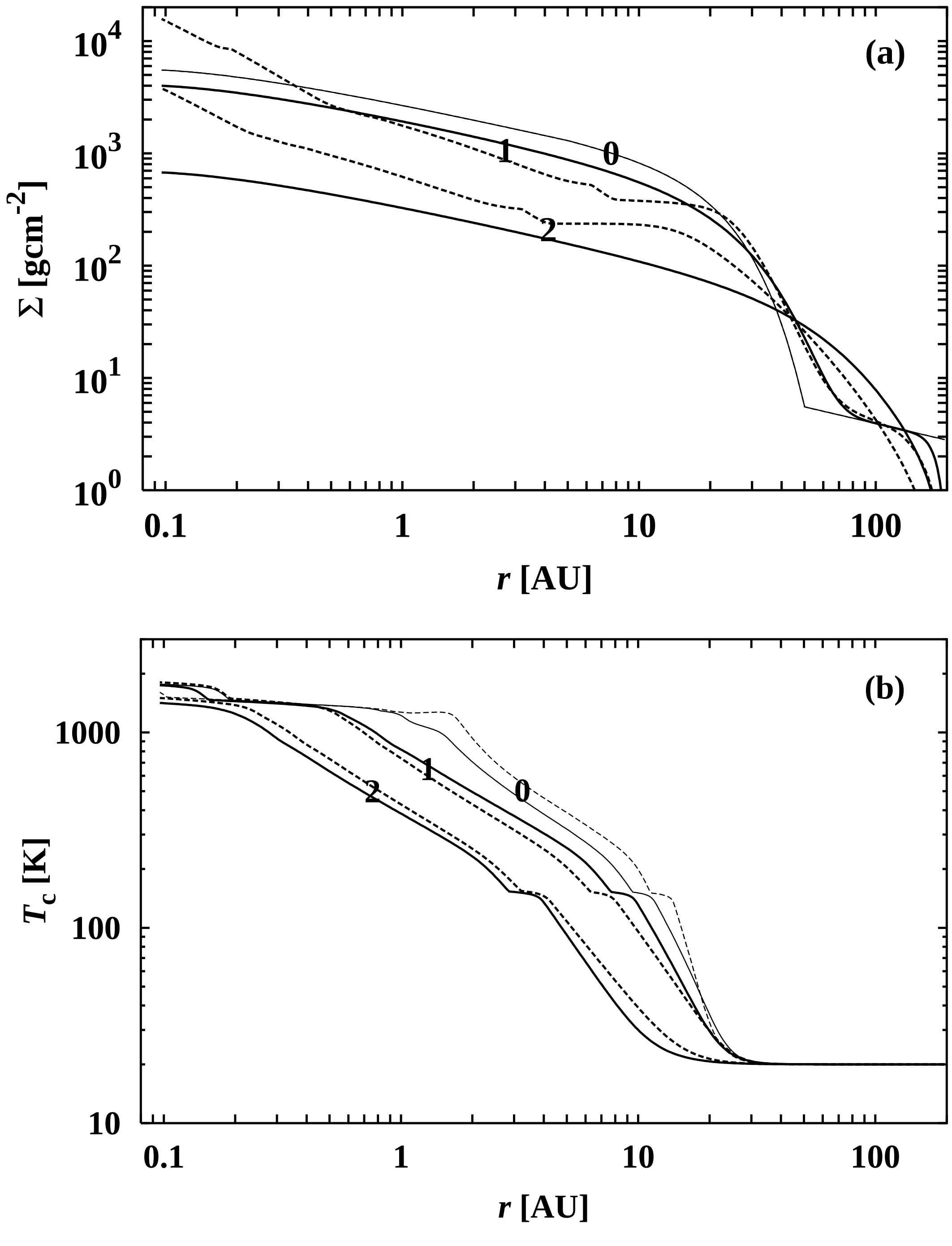


Abbildung 2.8.2: Radiale Struktur des Scheibenmodells mit β-Viskosität und der quasistationären Innenrandbedingung (Modell 1DB0G; durchgezogene Linien) im Vergleich mit dem Scheibenmodell mit α-Viskosität und der quasistationären Innenrandbedingung (Modell 1DAS; gestrichelte Linien) zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Flächendichte Σ. **(b)** Temperatur T_c in der Mittelebene.

Zum einen ist dies auf die Entkopplung der β-Viskosität von thermodynamischen Größen zurückzuführen. Die Flächendichte weist aus diesem Grund bei β-Scheiben im Gegensatz zu α-Scheiben einen glatten radialen Verlauf auf. Zum anderen sind die beiden Viskositätsparametrisierungen grundsätzlich durch voneinander verschiedene radiale Potenzgesetze $\nu \propto r^\gamma$ ausgezeichnet. Während bei der β-Viskosität exakt $\gamma = \frac{1}{2}$ gilt, folgt im Falle der α-Viskosität für weite Bereiche der Scheibe $\gamma = 0.5 \ldots 1.5$, wobei in den Regionen der Staub- bzw. Eisverdampfung γ sogar negativ werden kann.

Welcher Ansatz der Viskositätsparametrisierungen nun die Viskosität in Scheiben realistischer beschreibt, ist beim derzeitigen Stand der Forschung noch offen, da der Antriebsmechanismus der Turbulenz in Scheiben bisher nicht bekannt ist. In Modellrechnungen für protoplanetare Scheiben, für deren Masse $M_{\rm disk}/M_* \gtrsim 0.02$ gilt, ist die Selbstgravitation der Scheibe jedoch nicht mehr vernachlässigbar. In diesem Fall ist aus dem Grund, der am Ende des Abschnitts 2.6 aufgeführt wurde, die β- der α-Viskosität vorzuziehen.

2.8.3 Selbstgravitation der Scheibe

Im Folgenden wird untersucht, wie sich die vertikale Selbstgravitation der Scheibe auf die radiale Scheibenstruktur auswirkt. Dazu werden folgende Modelle verglichen:

(1) Modell 1DB0G mit der quasistationären Innenrandbedingung und β-Viskosität.

(2) Modell 1DBS mit der quasistationären Innenrandbedingung, β-Viskosität und der vertikalen Selbstgravitation der Scheibe.

Die Ergebnisse dieser Modellrechnungen sind in Abb. 2.8.3 dargestellt. Im Einzelnen sind (a) die Flächendichte, (b) die Zentral-Temperatur, (c) das Verhältnis zwischen Druckskalenhöhe und Radius und (d) die vertikal gemittelte Dichte in Abhängigkeit vom radialen Abstand aufgetragen.

Die radialen Profile der Flächendichte Σ in den Modellen 1DB0G und 1DBS unterscheiden sich nicht voneinander (Abb. 2.8.3(a)). Dies liegt daran, daß die Flächendichte für Scheibenmodelle mit β-Viskosität unabhängig von der Selbstgravitation ist.

Die Zentral-Temperatur $T_{\rm c}$ ist wenig abhängig von der Selbstgravitation der Scheibe ($T_{\rm c} \propto \tau_{\rm R}^{1/4}$; siehe Glg. 2.6.15). Daher unterscheiden sich die radialen Profile der Zentral-Temperatur der Modelle 1DB0G und 1DBS nur geringfügig voneinander (Abb. 2.8.3(b)).

Dagegen zeigt das Verhältnis $h_{\rm s}/r$ im Modell 1DBS ein ausgeprägtes Minimum im äußeren Teil der Scheibe (Abb. 2.8.3(c)). Dies ist der Bereich, in dem die Scheibe vertikal selbstgravitierend ist, d.h. die vertikale Selbstgravitation der Scheibe gegenüber der vertikalen Gravitationsbeschleunigung des Sterns dominiert. Der selbstgravitierende Bereich erstreckt sich bei 10^5 a von ungefähr 1 bis $80\,\mathrm{AU}$. Durch die viskose Entwicklung der Scheibe verändert sich mit der Zeit Lage, Form und Ausdehnung des selbstgravitierenden Bereichs. Nach 10^6 a befindet sich dessen innerer Rand bei $\sim 3\,\mathrm{AU}$, während dessen äußerer Rand bis zur Grenze des Rechengebiets gewandert ist. Der innere Rand des selbstgravitierenden Bereichs bewegt sich mit der Zeit aufgrund des Massenverlusts der Scheibe nach außen. Der Massenverlust der Scheibe ist außerdem dafür verantwortlich, daß sich die Tiefe des Minimums von $h_{\rm s}/r$ im Laufe der Zeit verringert. Der äußere Rand des selbstgravitierenden Bereichs bewegt sich mit der Zeit nach außen, weil die Scheibe sich viskos ausdehnt (vergl. Abb. 2.8.3(a)).

Die vertikal gemittelte Dichte $\rho_{\rm m}$ zeigt ebenfalls eine deutliche Veränderung infolge der Selbstgravition der Scheibe (Abb. 2.8.3(d)). Nach 10^5 a ist $\rho_{\rm m}$ bei $25\,\mathrm{AU}$ im Modell 1DBS im Vergleich zum Modell 1DB0G um einen Faktor 3.6 größer. Dies ist genau der Faktor,

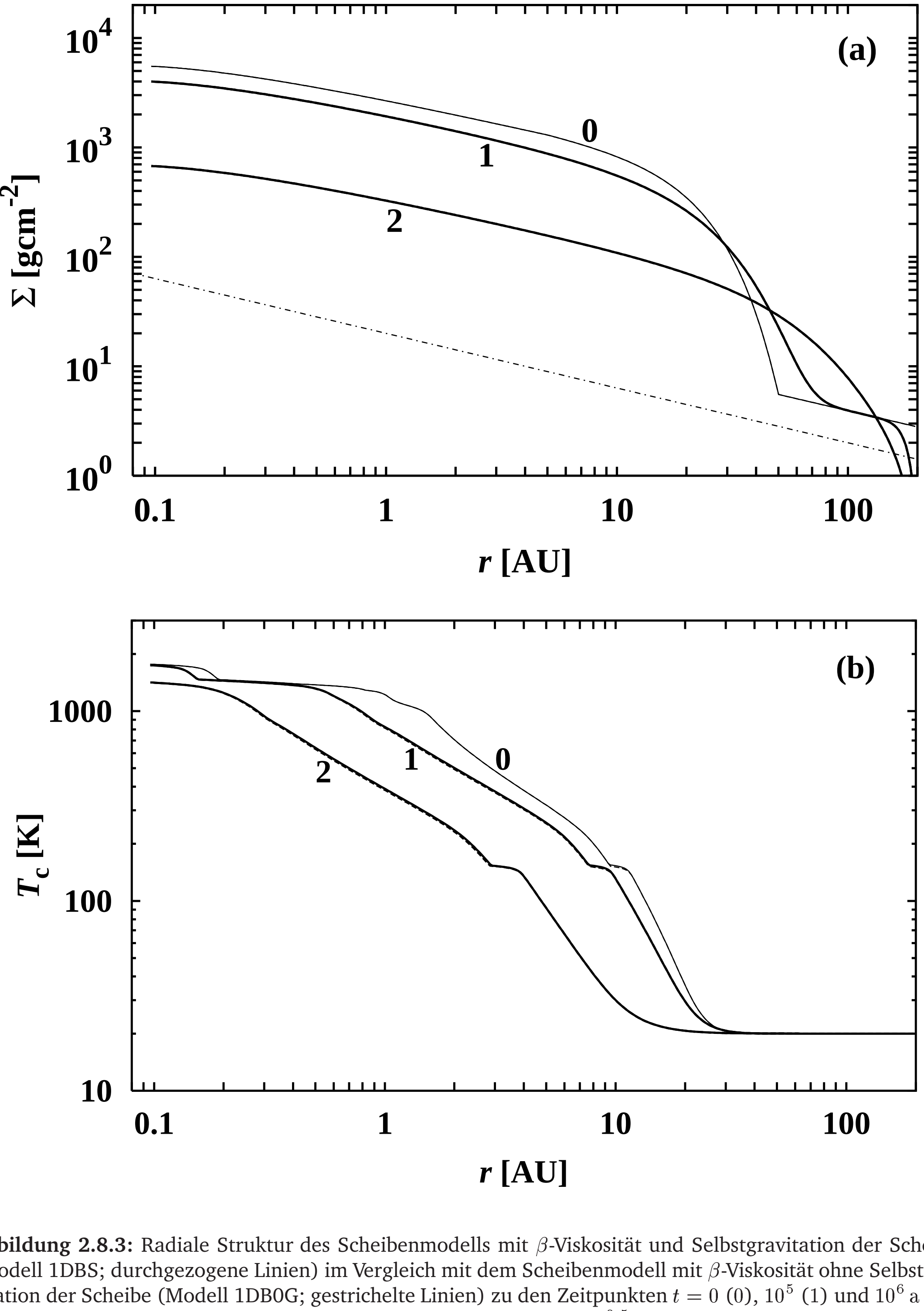


Abbildung 2.8.3: Radiale Struktur des Scheibenmodells mit β-Viskosität und Selbstgravitation der Scheibe (Modell 1DBS; durchgezogene Linien) im Vergleich mit dem Scheibenmodell mit β-Viskosität ohne Selbstgravitation der Scheibe (Modell 1DB0G; gestrichelte Linien) zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Flächendichte Σ. Die Strichpunktlinie ist eine Kurve mit $\Sigma \propto r^{-0.5}$, die dem Verlauf der Flächendichte einer stationären β-Scheibe entspricht. **(b)** Temperatur T_c in der Mittelebene. **(c)** Verhältnis h_s/r zwischen Druckskalenhöhe und Radius. **(d)** Vertikal gemittelte Dichte ρ_m. Das anfängliche radiale Dichteprofil ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

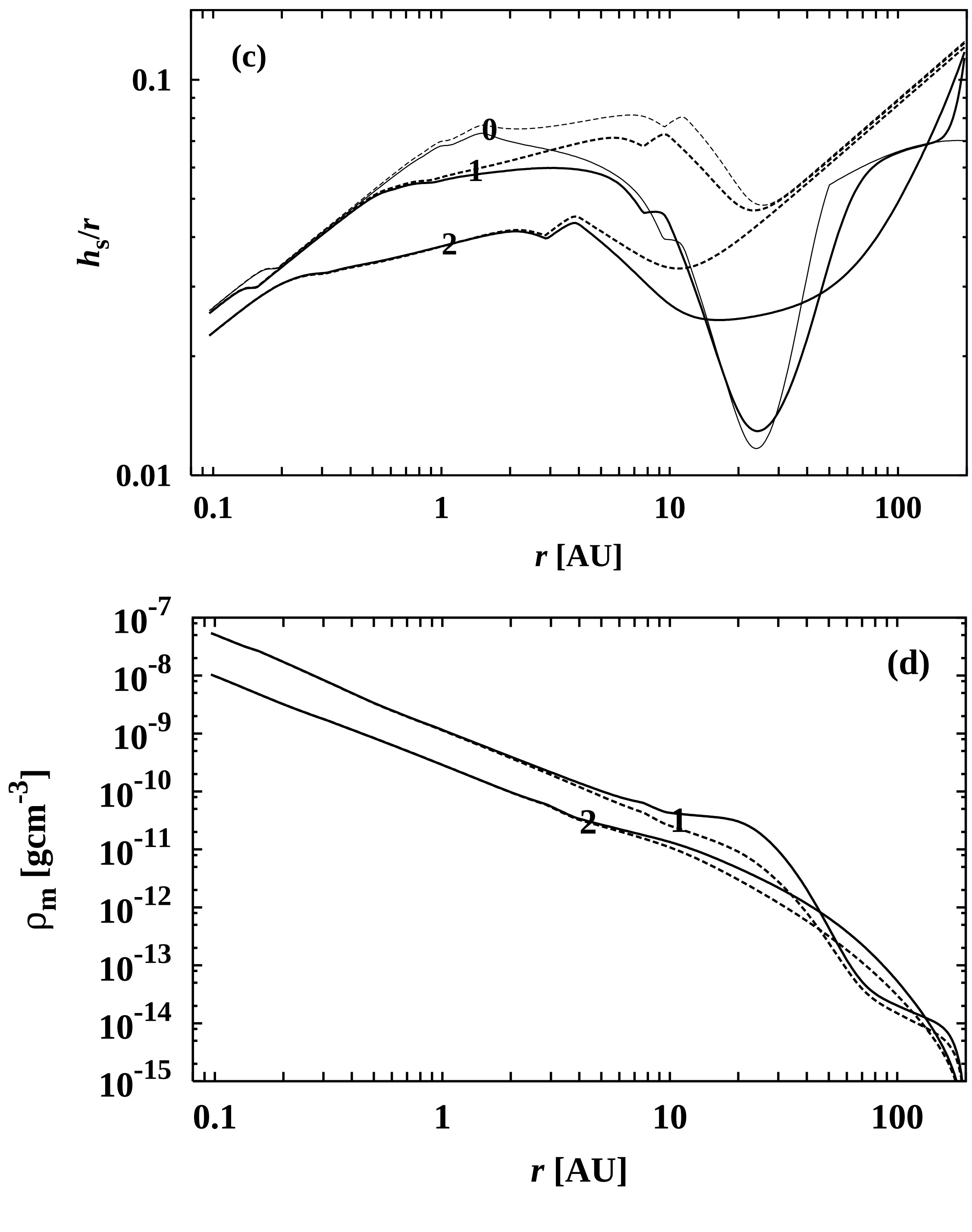


Abbildung 2.8.3: Fortsetzung.

um den h_s/r im Modell 1DBS gegenüber Modell 1DB0G am gleichen Ort verringert ist (vergl. Glg. (2.6.6)). Eine derartige Vergrößerung der Dichte dürfte die Chemie in den äußeren Scheibenregionen wesentlich beeinflussen, z.B. das Ausfrieren von Molekülen auf Staubkörnern. Die chemische Entwicklung der äußeren Scheibe wird im Rahmen dieser

Arbeit allerdings nicht untersucht.

Testrechnungen haben gezeigt, daß die Scheibenstruktur noch bis zu Massen von $M_{\rm disk} \sim 0.02\,M_*$ durch die Selbstgravitation der Scheibe wesentlich modifiziert wird. Dies betrifft folglich einen großen Prozentsatz der beobachteten protoplanetaren Scheiben. Unterhalb von $\sim 0.02\,M_\odot$ kann die Selbstgravitation der Scheibe in Scheibensimulationen vernachlässigt werden.

2.8.4 Scheibenstruktur mit Annealing

Als nächstes werden folgende Modelle verglichen:

(1) Modell 1DB0A mit der quasistationären Innenrandbedingung, β-Viskosität, Selbstgravitation der Scheibe und ohne Annealing der Silikate.

(2) Modell 1DBS mit der quasistationären Innenrandbedingung, β-Viskosität, Selbstgravitation der Scheibe und Berücksichtigung des Annealings der Silikate.

Abb. 2.8.4 zeigt das Ergebnis dieser Modellrechnungen. Es sind (a) die Zentral-Temperatur $T_{\rm c}$ und (b) die vertikal gemittelte Dichte $\rho_{\rm m}$ abhängig von r aufgetragen.

Der Verlauf der Zentral-Temperatur zeigt, daß die Scheibenstruktur durch das Annealing der Silikate deutlich modifiziert wird. Dies liegt daran, daß die kristallisierten Silikate im Vergleich zu amorphen Silikaten eine um etwa eine Größenordnung geringere Opazität aufweisen. Daher wird die Scheibe in jenen Bereichen effizienter gekühlt, in denen kristallisiertes Silikat vorkommt. Das Gebiet, in dem die Temperaturdifferenz zwischen den Modellen 1DB0A und 1DBS mehr als $50\,{\rm K}$ beträgt, erstreckt sich nach $10^5\,{\rm a}$ von 0.51 bis $2.15\,{\rm AU}$ und nach $10^6\,{\rm a}$ von 0.175 bis $0.84\,{\rm AU}$. Die maximale Temperaturdifferenz zwischen den Modellen erreicht etwa $280\,{\rm K}$! Die meisten chemischen Reaktionen reagieren sehr empfindlich auf bereits kleine Temperaturvariationen. Es wird daher empfohlen, das Annealing der Silikate in zukünftigen Scheibensimulationen zu berücksichtigen.

Das radiale Dichteprofil (Abb. 2.8.4(b)) wird ebenfalls durch das Annealing der Silikate modifiziert. Die Dichte vergrößert sich, wenn das Annealing der Silikate im Modell berücksichtigt wird. Dies liegt daran, daß eine Verringerung der Temperatur ein kleineres $h_{\rm s}$ zur Folge hat und damit $\rho_{\rm m}$ zunimmt (vergl. Glgen. (2.6.5) und (2.6.6)). Die maximale Dichtezunahme im Modell 1DBS gegenüber dem Modell 1DB0A beträgt $\sim 15\,\%$.

Die Flächendichte Σ wird durch das Annealing der Silikate nicht verändert, da diese in β-Scheiben unabhängig von thermodynamischen Größen ist. Der radiale Verlauf der Flächendichte für das Modell 1DB0A ist aus diesem Grund identisch mit dem des Modells 1DBS (siehe Abb. 2.8.3(a)).

2.8.5 Opazitätsstruktur der Scheibe

In diesem Abschnitt wird die Opazitätsstruktur der Scheibe untersucht. Zu diesem Zweck ist in Abb. 2.8.5 das Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten $\kappa_{\rm R}$ abhängig vom radialen Abstand r nach (a) 10^5 und (b) $10^6\,{\rm a}$ aufgetragen. Die Abbildungen zeigen auch den radialen Verlauf von $\kappa_{\rm R}$ der wichtigsten Absorber in der Scheibe.

Es läßt sich erkennen, daß die Opazität in jener Scheibenregion am größten ist, in der Staub existiert. Zwischen Temperaturen von $\sim 1\,350$ und $\sim 1\,450\,{\rm K}$ verdampfen Forsterit und Eisen als letzte Vertreter der Hauptkondensate, und die Opazität fällt um fast 2

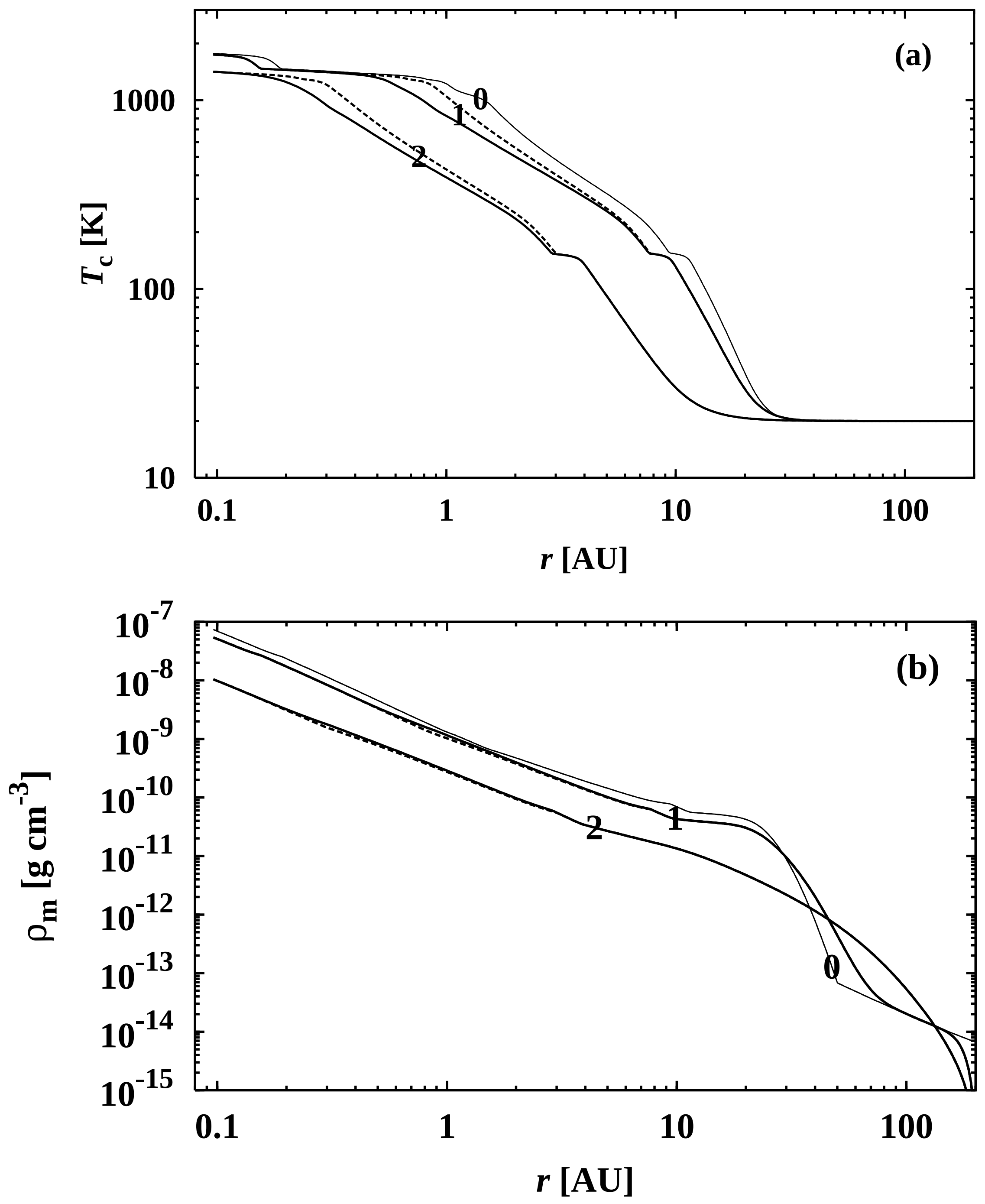


Abbildung 2.8.4: Radiale Struktur des Standard-Scheibenmodells 1DBS (durchgezogene Linien) im Vergleich mit dem Modell 1DB0A ohne Annealing der Silikate (gestrichelte Linien) zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Temperatur T_c in der Mittelebene. **(b)** Vertikal gemittelte Dichte ρ_m.

Größenordnungen. Bei einer Temperatur von $\sim 1\,850\,\mathrm{K}$ verdampft schließlich auch das Hochtemperaturkondensat Korund. Für höhere Temperaturen tragen nur noch die Mo-

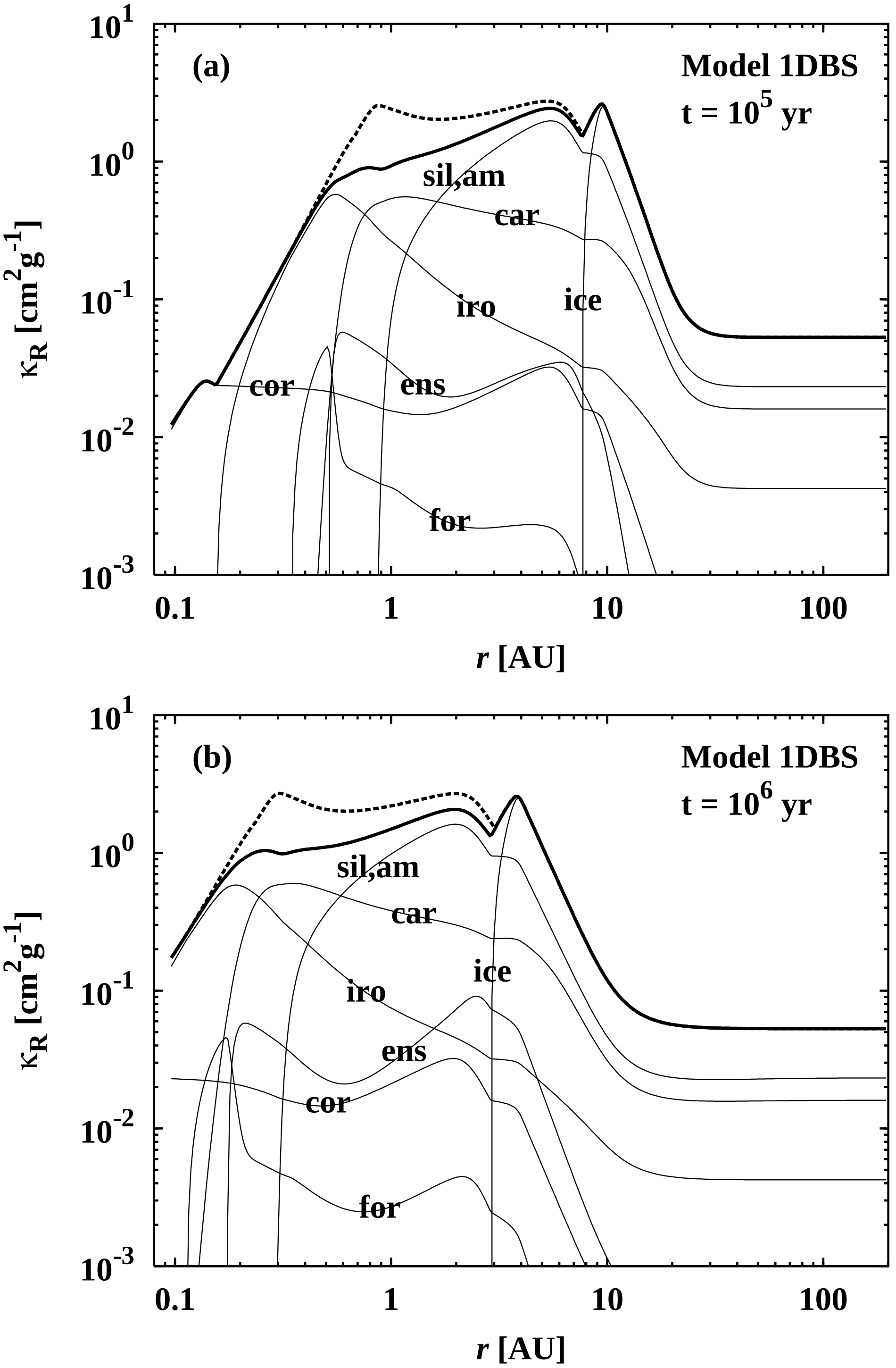


Abbildung 2.8.5: Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten κ_{R} abhängig vom radialen Abstand r im Modell 1DBS (Standardmodell). Die dicke, durchgezogene Linie zeigt den Verlauf der Gesamtopazität und die dünnen, durchgezogenen Linien die Verläufe der Opazitäten der einzelnen Absorber. Diese sind durch Abkürzungen gekennzeichnet. Die dicke, gestrichelte Linie zeigt den Verlauf von κ_{R} im Modell ohne Annealing der Silikate (Modell 1DB0A). **(a)** $t = 10^5$ a. **(b)** $t = 10^6$ a.

leküle zur Opazität bei, so daß κ_R ein Minimum von $\sim 10^{-3}\,\mathrm{cm}^2\,g^{-1}$ durchläuft.[10] Jenseits der Eisfront fällt κ_R um über 1 Größenordnung, da die Eisopazität im Modell quadratisch von der Temperatur abhängt (vergl. Glg. (A.2.13)).

Abb. 2.8.5 zeigt darüber hinaus, wie die einzelnen Absorber zur Gesamtopazität beitragen. In den inneren bis mittleren Bereichen der Scheibe sind die Hauptkondensate (Silikate, Eisen) sowie der Kohlenstoffstaub die Hauptabsorber, während in den Außenbereichen einzig eisummantelte Staubkörner zur Opazität beitragen (beachte den Faktor $(1 - f_\mathrm{ice})$ in Glg. (2.6.11)). In der innersten Scheibenregion ist das refraktäre Korund trotz seiner geringen Häufigkeit der dominierende Absorber.

Des weiteren zeigt Abb. 2.8.5 den radialen Verlauf der Opazität des Modells ohne Annealing der Silikate (Modell 1DB0A; gestrichelte Linie). Das lokale Opazitätsmaximum nahe der Zone der Staubverdampfung in Modell 1DB0A ist auf amorphes Silikat zurückzuführen. Im Modell 1DBS dagegen kristallisiert das amorphe Silikat bei einer Temperatur von $\sim 900\,\mathrm{K}$ vollständig (nach $t = 10^5\,\mathrm{a}$ bei $\sim 0.9\,\mathrm{AU}$), was die Verringerung der Opazität im Scheibenbereich mit $\gtrsim 900\,\mathrm{K}$ erklärt. Darüber hinaus wird kristallines Silikat durch diffusiven Transport mit der Zeit radial nach außen gemischt (vergl. Abbildungen 2.8.5(a) und (b)). Dies erklärt die vergleichsweise geringe Opazität im Modell 1DBS im Scheibenbereich mit $\lesssim 900\,\mathrm{K}$. Das Ausmaß des diffusiven Mischens von Tracern wird im folgenden Abschnitt genauer untersucht.

Schließlich läßt Abb. 2.8.5 erkennen, wie das ursprüngliche, amorphe ISM-Silikat in den inneren Bereichen der Scheibe equilibriert wird. Betrachtet man ein Ensemble von Silikatteilchen, das in der Scheibe radial einwärts wandert, so kristallisieren zunächst die Silikatteilchen bei einer Temperatur von $\sim 900\,\mathrm{K}$. Aus Glgen. (2.3.10) und (2.3.11) folgt, daß Forsterit und Enstatit dann zu Anteilen von

$$f_\mathrm{for} = \frac{\epsilon_\mathrm{Mg} - \epsilon_\mathrm{Si}}{\epsilon_\mathrm{Si}}\,, \qquad f_\mathrm{ens} = \frac{2\epsilon_\mathrm{Si} - \epsilon_\mathrm{Mg}}{\epsilon_\mathrm{Si}} \tag{2.8.1}$$

vorliegen. Im Modell sind die Werte $f_\mathrm{for} = 0.075$ und $f_\mathrm{ens} = 0.925$. Enstatit ist also in diesem Scheibenbereich um einen Faktor ~ 12 häufiger als Forsterit. Dies liegt daran, daß bei solarer Elementmischung Mg nur geringfügig häufiger als Si ist (vergl. Abb. 2.3.1). Im chemischen Gleichgewicht werden unter dieser Voraussetzung die Mg-Atome bevorzugt in Enstatit ($\mathrm{MgSiO_3}$) und weniger wahrscheinlich in Forsterit ($\mathrm{Mg_2SiO_4}$) gebunden. Wandert das Ensemble von Silikatteilchen nun weiter einwärts, so verdampft Enstatit bei einer Temperatur von $\sim 1\,300\,\mathrm{K}$. Das freiwerdende Si kann jedoch nicht mehr gänzlich in Forsterit gebunden werden, da dies eine doppelt so große Magnesium- wie Siliziumhäufigkeit erfordert. Der maximale Anteil des Si, der in diesem Bereich noch in Forsterit gebunden wird, beträgt im Modell $f_\mathrm{for} \sim 0.5$. Schließlich ist auch Forsterit bei $\sim 1\,400\,\mathrm{K}$ vollständig verdampft, und alles Si befindet sich in der Gasphase.

2.8.6 Radialer Tracer-Transport

Bei unvoreingenommener Herangehensweise an den Stofftransport in protoplanetaren Scheiben ist zunächst nicht zu erwarten, daß Tracer in größerem Maße radial in der Scheibe nach außen transportiert werden. Die radiale Driftgeschwindigkeit v_r ist in typischen

[10] In den Scheibensimulationen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt worden sind, werden Temperaturen größer als $1\,850\,\mathrm{K}$ zu keinem Zeitpunkt erreicht.

Tabelle 2.8.2: Radiale Entfernung r in AU, bei der ein bestimmter Kristallisationsgrad der Silikate erreicht wird, nach 10^5 und 10^6 a.

$t\,[\mathrm{a}]$	$f_{\mathrm{cry,for}} = 0.2$	0.1	0.01	$f_{\mathrm{cry,ens}} = 0.2$	0.1	0.01
10^5	4.8	6.9	13.3	4.5	6.5	12.8
10^6	3.9	10.2	68	3.5	9.0	65

Scheibenmodellen für $r < 10\,\mathrm{AU}$ bis $t = 10^6$ a negativ und sorgt somit für einen einwärts gerichteten advektiven Transport in den chemisch aktiven Scheibenregionen. Der diffusive radiale Massenfluß ist zwar von gleicher Größenordnung wie der advektive, jedoch ist die turbulente Diffusion isotrop. Daher ist eigentlich zu erwarten, daß lediglich ein geringer Anteil der Tracer die äußeren Scheibenregionen erreicht. In Abb. 2.8.6 ist jedoch zu sehen, wie effizient Tracer tatsächlich in der Scheibe radial auswärts transportiert werden.

Kristallisierte Silikate Abb. 2.8.6(a) zeigt den radialen Verlauf des Kristallisationsgrads von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$ (durchgezogene Linien) und Enstatit $f_{\mathrm{cry,ens}}$ (gestrichelte Linien) im Standardmodell nach den Entwicklungszeiten der Scheibe von $t = 0$, 10^5 und 10^6 a. Zu Beginn der Modellrechnung kristallisieren die Silikate in den inneren Bereichen der Scheibe durch Annealing in einer Zeit, die – gemessen an der viskosen Zeitskala – kurz ist. Forsterit ist bei $\sim 900\,\mathrm{K}$ und Enstatit bei $\sim 1\,000\,\mathrm{K}$ vollständig kristallisiert. Dies liegt an den unterschiedlichen Aktivierungsenergien für Umordnungsprozesse im Gitter, welche die beiden Silikate beim Annealing nach Labormessungen aufweisen (vergl. Abschnitt 2.5.1).

Die ‚Kristallisationsfront' der Silikate bewegt sich im Laufe der Scheibenentwicklung nach innen, weil die Scheibe durch Akkretion einen Teil ihrer Masse an den Stern verliert und dabei abkühlt. Daher nimmt der Kristallisationsgrad für $r \lesssim 5\,\mathrm{AU}$ mit der Zeit langsam ab (Abb. 2.8.6(a)). In den äußeren Regionen der Scheibe führt die turbulente Diffusion allerdings dazu, daß ein signifikanter Anteil der kristallisierten Silikate bis in vom Stern weit entfernte Regionen transportiert wird. Einige Werte für die radiale Entfernung r, bis zu denen ein bestimmter Anteil an kristallinem Silikat $f_{\mathrm{cry,for}}$ bzw. $f_{\mathrm{cry,ens}}$ im Modell 1DBS gelangt ist, sind in Tab. 2.8.2 aufgeführt.

Der turbulente Transport in protoplanetaren Scheiben bietet eine natürliche Erklärung für das kristalline Silikat, welches in vielen Kometen in Anteilen bis zu $\sim 20\,\%$ beobachtet wird (Hanner et al. 1994a; Hanner et al. 1994b; Crovisier et al. 1997; Hanner et al. 1997; Yanamandra-Fisher & Hanner 1999). Der Bereich im solaren Nebel, in dem die Kometen entstanden sind, dürfte außerhalb der Sublimationsfront von Wassereis gelegen haben, d.h. bei $r \gtrsim 5\,\mathrm{AU}$ (je nach Entwicklungszeit der Scheibe; vergl. Abb. 2.8.5). In diese Bereiche werden die kristallinen Silikate in ausreichenden Mengen ($f_{\mathrm{cry}} > 10\,\%$) bereits nach $\sim 10^5$ a gemischt (Tab. 2.8.2). Das thermische Annealing könnte darüber hinaus das kristalline Silikat erklären, das in den Spektren der Scheiben um einige T Tauri-Sterne beobachtet wird (Weinberger et al. 2002; Honda et al. 2003).

Verbrennung des Kohlenstoffstaubs Wie die Kristallisationsfront der Silikate wandert auch die Verbrennungsfront des Kohlenstoffstaubs durch die Abkühlung der Scheibe mit der Zeit nach innen (Abb. 2.8.6(b)). Die vollständige Verbrennung des Kohlenstoffstaubs im Modell erfolgt zum Zeitpunkt $t = 0$ bei einer Temperatur von $\sim 1\,250\,\mathrm{K}$, nach 10^6 a dagegen bei einer Temperatur von $\sim 1\,400\,\mathrm{K}$. Dies hat seine Ursache darin, daß die Effizienz

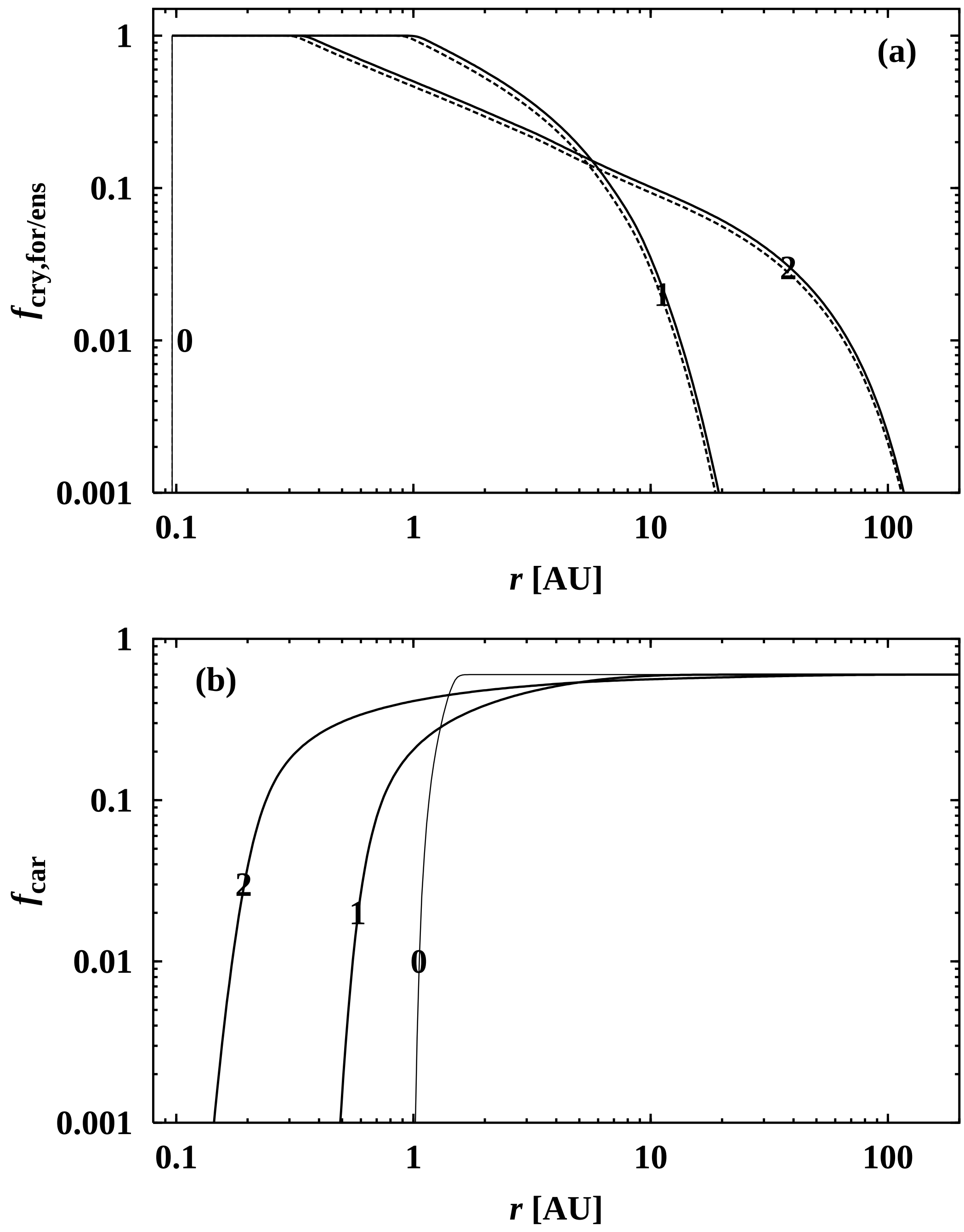


Abbildung 2.8.6: Tracer-Transport im Standardmodell 1DBS nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Kristallisationsgrad von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$ (durchgezogene Linien) und Enstatit $f_{\mathrm{cry,ens}}$ (gestrichelte Linien). **(b)** Kondensationsgrad von Kohlenstoff in Kohlenstoffstaub f_{car}.

der Verbrennung von Ruß im wesentlichen von der Dichte der OH-Moleküle abhängig ist (vergl. Glg. (2.5.10) und Abb. 2.5.3).

In Abb. 2.8.7 ist der Verlauf des OH-Partialdrucks p_{OH} für die innersten 3 AU der Scheibe zu verschiedenen Zeitpunkten aufgetragen. Die Abbildung zeigt zum Vergleich auch den radialen Verlauf des Gesamtdrucks P_{c}. Mit dem Massenverlust der Scheibe sinkt p_{OH}

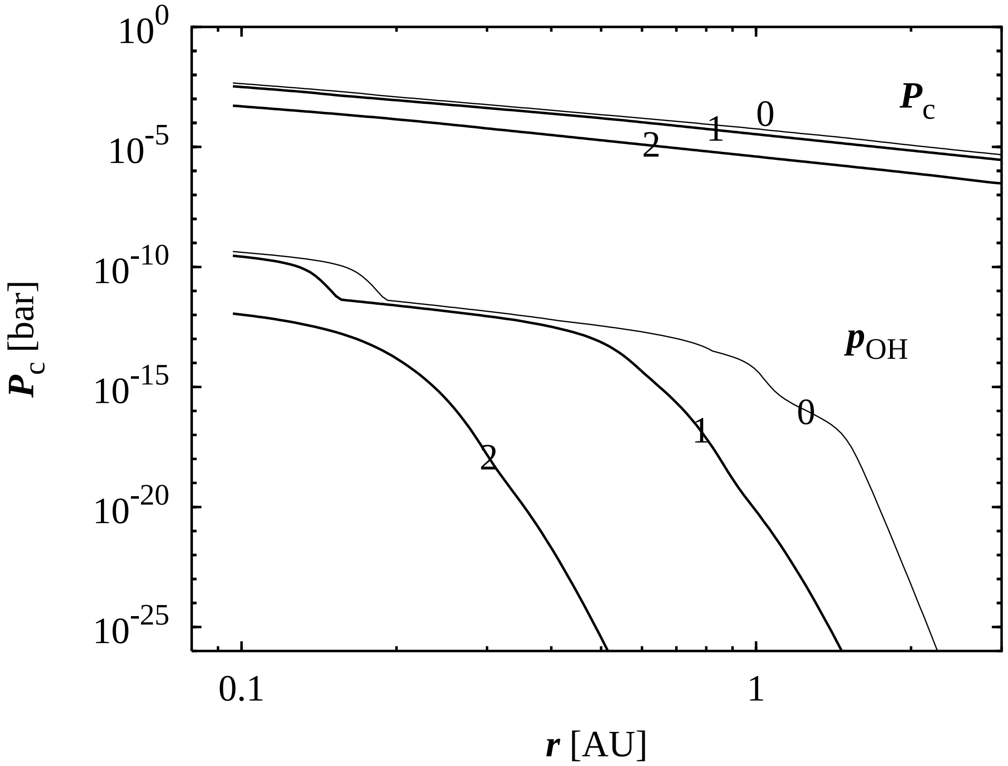


Abbildung 2.8.7: Gesamtdruck P_c (oben) und Partialdruck der OH-Moleküle p_{OH} (unten) in der Scheiben-Mittelebene nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). Es sind die innersten 3 AU der Scheibe abgebildet.

im Laufe der Zeit. Dies hat zur Folge, daß Ruß zunehmend ineffizienter durch OH verbrannt wird und die Verbrennungsfront von Ruß mit der Zeit zu höheren Temperaturen hin verschoben wird.

Abb. 2.8.7 zeigt auch, daß nur in den inneren Scheibenregionen die Kohlenstoffverbrennung überhaupt möglich ist, da nur dort ausreichend OH vorhanden ist. Die Ursache hierfür ist, daß sich OH im chemischen Gleichgewicht erst im Temperaturbereich $\sim 700 \ldots 1\,300\,\mathrm{K}$ aus Wasserdampf bildet. Bei Entwicklungszeiten der Scheibe von $\gg 10^6$ a ist OH infolge der fortschreitenden Abkühlung der Scheibe nicht mehr häufig genug, um den Kohlenstoffstaub vollständig verbrennen zu können. Für die Modellierung der späten Entwicklungsstadien von protoplanetaren Scheiben, welche im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt wird, ist es folglich notwendig, die thermische Verdampfung des Kohlenstoffstaubs in den Modellrechnungen zu berücksichtigen (falls die Scheibe dann für die Rußverdampfung noch heiß genug ist). Diese findet unter den Bedingungen von protoplanetaren Scheiben bei $\sim 1\,500\,\mathrm{K}$ statt (Finocchi et al. 1997).

In den Außenbereichen der Scheibe wird der Kohlenstoffstaub mit zunehmender Entwicklungszeit langsam abgebaut. Mit anderen Worten nimmt dort der Kondensationsgrad von C in Ruß, f_{car}, mit der Zeit ab. Der anfängliche Wert für f_{car} dort war 0.6 (Abb. 2.8.6(b)). Die Abnahme von f_{car} ist darauf zurückzuführen, daß die Verbrennungsprodukte des Kohlenstoffstaubs in der Scheibe diffusiv radial auswärts transportiert werden. Die Verbrennungsprodukte von Ruß und deren Transport in der Scheibe werden im Rahmen dieser Arbeit nicht modelliert. Allerdings konnte Gail (2002) mit Hilfe von stationären Schei-

benmodellen in der Einzonennäherung zeigen, daß kettenförmige Kohlenwasserstoffe wie Methan (CH_4) und Ethan (C_2H_6) in beträchtlichen Mengen bei der Kohlenstoffverbrennung entstehen und radial nach außen gemischt werden. Der Auswärtstransport der Verbrennungsprodukte von Ruß im solaren Nebel bietet somit eine mögliche Erklärung dafür, daß sich beträchtliche Mengen an Kohlenwasserstoffen in den Kometen befinden. Die Bereiche des solaren Nebels, in denen sich die Kometen bildeten, waren zu kühl, um Kohlenwasserstoffe wie Methan und Ethan auf thermischem Wege zu bilden.
Abb. 2.8.8 soll schließlich verdeutlichen, welchen Einfluß die Kohlenstoffverbrennung auf die Radiusverteilung des Kohlenstoffstaubs hat. In der Abbildung ist die Konzentration $c_{i,\rm car}$ von Kohlenstoffteilchen in Abhängigkeit vom radialen Abstand r und vom Teilchenradius a nach (a) 10^5 und (b) $10^6\,$a der Scheibenentwicklung aufgetragen. $c_{i,\rm car}$ gibt die Anzahl von Kohlenstoffteilchen pro Wasserstoffatom und pro Teilchenradius in μm an, wobei i für einen diskreten Teilchenradius steht. Zum einen ist die Abflachung des radialen Verlaufs der Ruß-Konzentration zu erkennen, die mit der Zeit durch das radiale Mischen der Verbrennungsprodukte von Ruß hervorgerufen wird (vergl. Abb. 2.8.6(b)). Zum anderen zeigt Abb. 2.8.8, daß die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs auf eine schmale Zone der Scheibe begrenzt ist. Die MRN-Radiusverteilung, die im Modell als Anfangsbedingung für den Kohlenstoffstaub angenommen wurde, wird nur dort deutlich modifiziert. Außerhalb der Verbrennungsfront bleibt die MRN-Radiusverteilung für den Ruß praktisch erhalten ($f(a) \propto a^{-3.5}$).

2.8.7 Scheiben mit unterschiedlicher Metallizität

Wehrstedt & Gail (2003) berechneten Einzonenmodelle von protoplanetaren Scheiben, die eine unterschiedliche Metallizität aufweisen. Die Elementmischungen für die Modelle mit unterschiedlicher Metallizität wurden so gewählt, daß sie mit den Elementhäufigkeiten in typischen sonnennahen Sternen der Galaxis übereinstimmen. Die Daten für die Variation der Elementhäufigkeiten sonnennaher Sterne mit der Metallizität wurden dabei den Arbeiten von Timmes et al. (1995) und Portinari et al. (1998) entnommen.
Das wesentliche Ergebnis dieser Modelle ist, daß Scheiben mit Metallizitäten $[\mathrm{Fe/H}] < 0$ weniger Staub bilden können. Dies ist darauf zurückzuführen, daß mit abnehmender Metallizität nicht nur die Häufigkeit von Fe, sondern typischerweise auch die Häufigkeiten der anderen Staubbildner abnehmen. Mit geringer werdender Staubhäufigkeit nimmt die optische Tiefe in den Scheiben ab, was eine Verringerung der Temperatur nach sich zieht. Scheiben mit geringer Metallizität sind folglich kühler als solche mit großer Metallizität.
Abb. 2.8.9 zeigt das Staub-zu-Gas-Massenverhältnis $f_{\rm dust:gas}$ im Standardmodell 1DBS, das eine solare Elementmischung aufweist ($[\mathrm{Fe/H}] = 0$), im Vergleich zum Modell 1DBF, welches deutlich metallärmer ist ($[\mathrm{Fe/H}] = -2.0$).
Das Standardmodell 1DBS zeigt, daß bei solarer Elementmischung der Massenanteil des Staubes ungefähr $0.5\,\%$ der Gesamtmasse ausmacht (Abb. 2.8.9 oben). Im Bereich, in dem Eis existiert, steigt $f_{\rm dust:gas}$ sogar auf über $1\,\%$. Die Eismäntel, die sich in den kühlen Außenregionen der Scheibe um die Staubkörner ausbilden, vereinigen in sich folglich die Hälfte der Masse aller Kondensate. Die andere Hälfte der Masse ist zwischen Kohlenstoffstaub, Silikaten und metallischem Eisen ungefähr im Verhältnis $1 : 2 : 1$ verteilt. Korund trägt nur einen unwesentlichen Teil zur Masse der Kondensate bei.
Das Modell 1DBF weist verglichen mit dem Modell 1DBS dagegen eine wesentlich geringere Staubhäufigkeit auf (Abb. 2.8.9 unten). $f_{\rm dust:gas}$ ist im Vergleich zur solaren

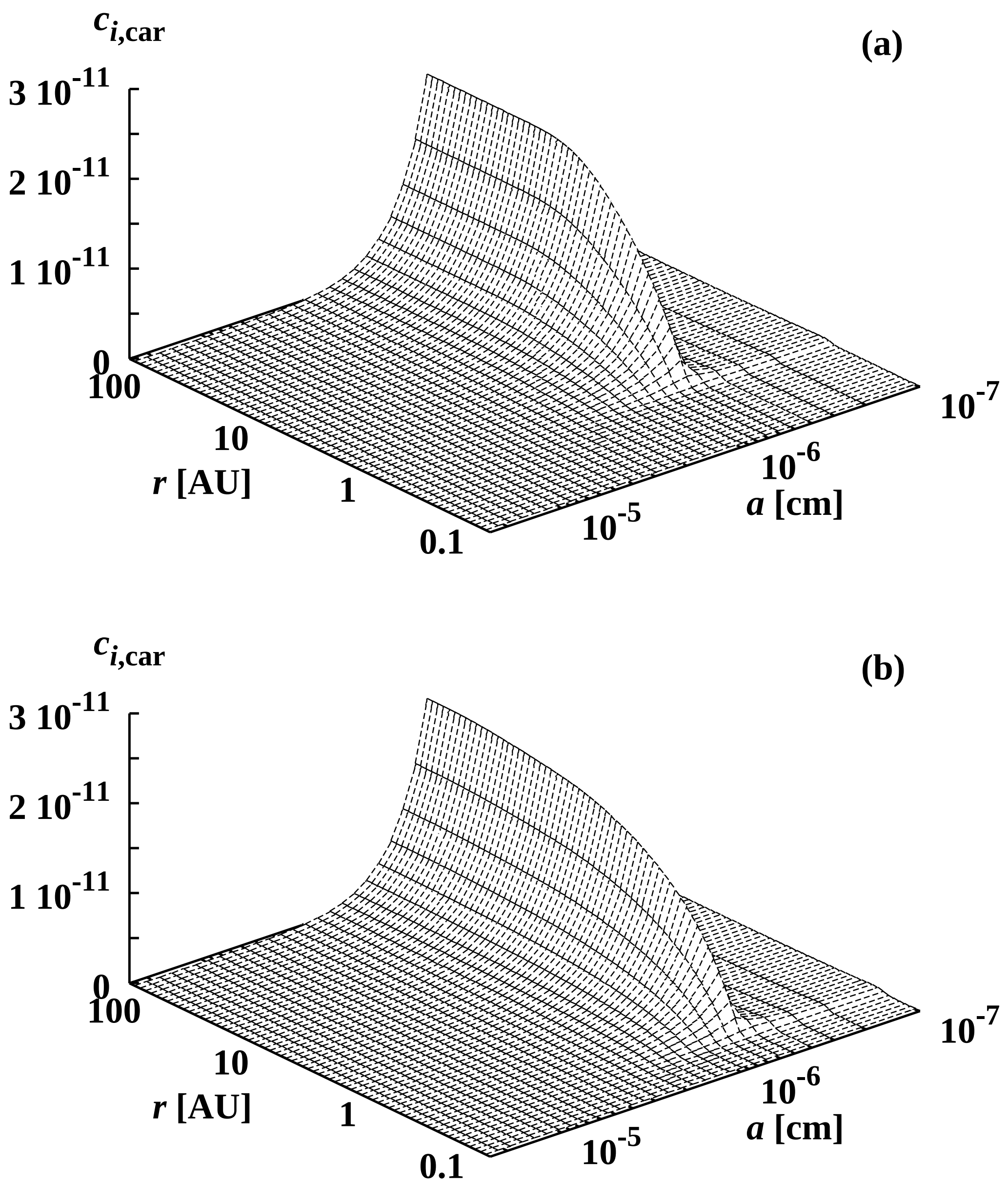


Abbildung 2.8.8: Konzentration $c_{i,\mathrm{car}}$ von Kohlenstoffteilchen aufgetragen gegen den radialen Abstand r vom Stern und den Teilchenradius a. $c_{i,\mathrm{car}}$ gibt die Anzahl von Kohlenstoffteilchen pro Wasserstoffatom und pro Teilchenradius in μm an, wobei i einen diskreten Teilchenradius kennzeichnet. **(a)** Nach 10^5 a und **(b)** nach 10^6 a der Scheibenentwicklung.

Staubhäufigkeit um einen Faktor ~ 50 reduziert. Dieser Faktor ist kleiner als 100, d.h. dem Wert, der für eine Metallizität von -2.0 zu erwarten wäre. Die Ursache hierfür ist, daß die relativen Elementhäufigkeiten, die typische Sterne der Sonnenumgebung aufweisen, nicht den relativen Häufigkeiten der solaren Elementmischung entsprechen. Bei Sternen der Metallizität -2.0 sind z.B. die Häufigkeitsverhältnisse $\mathrm{O/Fe}$, $\mathrm{Mg/Fe}$ und $\mathrm{Si/Fe}$ um einen Faktor ~ 3 größer als in der Sonne, während $\mathrm{C/Fe}$ ungefähr gleich ist. Das Massen-

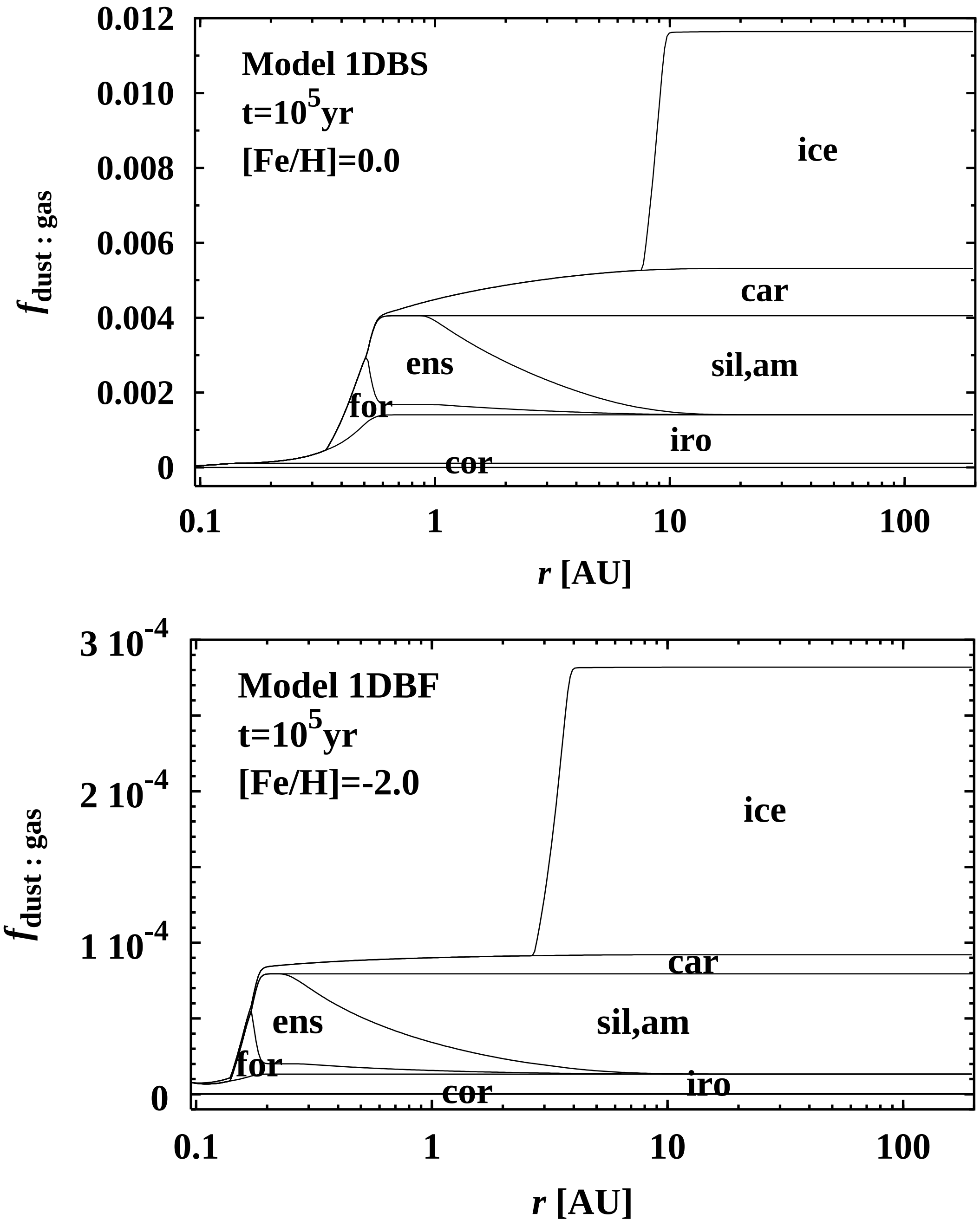


Abbildung 2.8.9: Kumulative Verteilung der Staub-zu-Gas-Massenverhältnisse der verschiedenen Staubsorten, abhängig vom radialen Abstand r nach 10^5 a. **Oben:** Standardmodell 1DBS (solare Elementmischung). **Unten:** Modell 1DBF mit $[\mathrm{Fe/H}] = -2.0$.

verhältnis zwischen Kohlenstoffstaub, Silikaten und Eisen beträgt im Modell 1DBF daher $1:6:1$. Eis trägt im Bereich seiner Existenz etwa $\frac{2}{3}$ zur Massenbilanz der Kondensate bei.

Abb. 2.8.9 verdeutlicht überdies nochmals, wie weit die kristallisierten Silikate bereits nach 10^5 a durch die turbulente Diffusion radial nach außen gemischt worden sind. Diese verdünnen mit zunehmender Entwicklungszeit der Scheibe das unequilibrierte amorphe

Silikat in den äußeren Scheibenregionen. Im inneren Bereich der Scheibe befinden sich die Silikate dagegen im chemischen Gleichgewicht.

Kapitel 3

Das vertikale Scheibenmodell

In Kapitel 2 wurde das radiale Modell der protoplanetaren Scheibe beschrieben. Es folgt nun die Darstellung des vertikalen Modells.

3.1 1+1-dimensionale Näherung

Das in Kapitel 2 vorgestellte radiale Modell der protoplanetaren Scheibe basierte auf den Annahmen der Einzonennäherung. Die wesentliche Annahme der Einzonennäherung war, daß die vertikale Ausdehnung der Scheibe viel geringer als deren radiale Ausdehnung ist. Unter den Voraussetzungen der Einzonennäherung konnten alle wichtigen physikalischen Größen zur Beschreibung der Scheibenstruktur in der Mittelebene der Scheibe näherungsweise berechnet werden.

Aufbauend auf dem radialen Modell der Einzonennäherung läßt sich an jedem radialen Punkt der Scheibe ein Modell für die Struktur der Scheibe in vertikaler Richtung aufsetzen. Bei dieser Vorgehensweise wird folglich die Scheibenstruktur in zwei Dimensionen aufgelöst. Dies ist die sogenannte *1+1-dimensionale Näherung*.

Streng genommen ist für eine exakte Berechnung der Scheibenstruktur in zwei Dimensionen die Anwendung von 2-dimensionaler Hydrodynamik erforderlich. Bei der 1+1-dimensionalen Näherung nimmt man jedoch vereinfachend an, daß lediglich Punkte in der Mittelebene der Scheibe untereinander physikalische Information in radialer Richtung austauschen können. Es wird dagegen ignoriert, daß Punkte ober- bzw. unterhalb der Scheiben-Mittelebene Information über ihre radialen Nachbarpunkte besitzen, d.h. die Berechnung physikalischer Größen in einer Höhe z oberhalb (oder unterhalb) der Mittelebene der Scheibe erfolgt gänzlich unabhängig von den Werten dieser Größen an den radialen Nachbarpunkten in gleicher Höhe.

Eine weitere Vereinfachung bei der 1+1-dimensionalen Näherung ist, daß die Neigung der Oberfläche der Scheibe gegenüber der Mittelebene vernachlässigt wird. Bei der 1+1-dimensionalen Näherung wird die Scheibenstruktur in Zylinder-Koordinaten (r, z) dargestellt. Damit findet im Rahmen der 1+1-dimensionalen Näherung der Energietransport in der Scheibe und die Abstrahlung der Energie an der Oberfläche ausschließlich in vertikaler Richtung statt. Ebenso weisen die Gradienten physikalischer Größen, wie z.B. der Druckgradient, ausschließlich in vertikale Richtung, d.h. die radialen Gradienten physikalischer Größen werden vernachlässigt.

Die 1+1-dimensionale Näherung besitzt gegenüber der exakten 2-dimensionalen Berechnung der Scheibenstruktur folgende Vorteile: Zum einen erfolgt eine deutliche Einsparung an Rechenzeit, mit Hilfe derer sich ein Mehr an Physik (z.B. ein umfangreiches chemisches Netzwerk) in Scheibenmodellen berücksichtigen läßt, ohne an die Grenze der Leistungsfähigkeit derzeitiger Rechner zu gelangen. Andererseits vermeidet man bei der 1+1-dimensionalen Näherung die numerischen Schwierigkeiten, die i. A. bei Problemen der mehrdimensionalen Hydrodynamik auftreten (z.B. geeignete Wahl der Randbedingungen).

3.2 Vertikale Scheibengleichungen

Es werden im Folgenden die Gleichnungen beschrieben, die für die Berechnung der vertikalen Struktur der Scheibe im Modell verwendet werden.

3.2.1 Flächendichte-Variable

Es wird zunächst eine neue Variable eingeführt, welche die Flächendichte abhängig von der vertikalen Richtung beschreibt. Sie ist definiert durch

$$\sigma_z(z) = \int_0^z \rho(z')\, dz' \ , \tag{3.2.1}$$

wobei $\rho(z)$ die Massendichte in Abhängigkeit der Höhe z über der Mittelebene darstellt. Aufgrund der Spiegelsymmetrie der Scheibe an ihrer Mittelebene reicht es aus, lediglich eine Halbebene der Scheibe zu betrachten ($z \geq 0$). Nach der Definition (3.2.1) folgt für die Gesamt-Flächendichte

$$\Sigma = 2\,\sigma_z(\infty) \ . \tag{3.2.2}$$

In der Scheiben-Mittelebene gilt $\sigma_z(0) = 0$.

Für die Berechnung der vertikalen Scheibenstruktur wird Glg. (3.2.1) in differentieller Form dargestellt:

$$\frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \rho \ . \tag{3.2.3}$$

3.2.2 Druckschichtung

Die vertikale Druckschichtung der Scheibe wurde bereits in Abschnitt 2.2.3 behandelt. Dort wurde die Gleichung für den vertikalen Druckgradienten (Glg. (2.2.18)) zur Bestimmung der Druckskalenhöhe (Glg. (2.2.20)) und der vertikal gemittelten Dichte (Glg. (2.2.21)) des radialen Modells verwendet. Unter Ausnützung von Glg. (3.2.2) folgt gemäß Glg. (2.2.18) für die vertikale Druckschichtung

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial P_z}{\partial z} = -\Omega^2 z - 4\pi G \sigma_z \ . \tag{3.2.4}$$

Auch im vertikalen Scheibenmodell wird die Selbstgravitation der Scheibe berücksichtigt (zweiter Term auf der rechten Seite von Glg. (3.2.4)).

3.2.3 Vertikaler Energiefluß

Der Energiefluß ist definiert als die Energie, die pro Zeiteinheit durch ein Einheits-Flächenstück fließt. Sei $F_z(z)$ der vertikale Energiefluß in der protoplanetaren Scheibe. Nimmt man wie bisher an, daß die Dissipation von viskoser Reibung die einzige Energiequelle in der Scheibe darstellt (siehe Abschnitt 2.2.4), so folgt für den vertikalen Gradienten des Energieflusses (z.B. Lin & Papaloizou 1985)

$$\frac{\partial F_z}{\partial z} = \frac{9}{4}\Omega^2 \nu \rho \,. \tag{3.2.5}$$

Nach Glg. (2.2.22) gilt damit für die viskose Dissipationsrate $\dot{E}_\nu = F_z(\infty)$.

Viskosität im vertikalen Modell Für die Bestimmung von F_z ist laut Glg. (3.2.5) die Abhängigkeit der Vikosität ν von der Höhe z anzugeben. Über den Mechanismus, der für die Turbulenz und damit für die turbulente Viskosität in protoplanetaren Scheiben verantwortlich ist, besteht derzeit allerdings noch Unkenntnis (siehe Abschnitt 2.2.2). Daher ist ein Ansatz für die vertikale Abhängigkeit von ν zu wählen. Im Rahmen des Modells wird die Viskosität vertikal konstant gleich dem Wert gesetzt, der aus dem Einzonenmodell folgt.

3.2.4 Vertikaler Energietransport

Energie soll im vertikalen Scheibenmodell einzig durch Strahlung transportiert werden, d.h. der konvektive Energietransport wird wie im radialen Modell vernachlässigt (siehe Abschnitt 2.2.5). Unter dieser Voraussetzung erhält man für den vertikalen Temperaturgradienten (z.B. Lin & Papaloizou 1985)

$$\frac{\partial T_z}{\partial z} = -\frac{3}{16}\,\frac{\kappa_\mathrm{R}\,\rho\,F_z}{\sigma T_z^3} \,. \tag{3.2.6}$$

Glg. (3.2.6) bestimmt die vertikale Temperaturschichtung der Scheibe.

Opazität im vertikalen Modell In Glg. (3.2.6) für die vertikale Temperaturschichtung wird für die Opazität der Scheibenmaterie das Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten κ_R verwendet. Dieses wird im vertikalen Modell auf die gleiche Weise bestimmt wie im radialen Modell (siehe Abschnitt 2.4 und Anhang A.2).

Eigentlich müßte in optisch dünnen Bereichen der Scheibe, z.B. in großer Höhe z über der Mittelebene, die Berechnung der Opazität über das Planckmittel des Massenextinktionskoeffizienten κ_P erfolgen. Um jedoch Diskontinuitäten im vertikalen Verlauf der Opazität zu vermeiden, wird die Opazität im vertikalen Modell der Einfachheit halber ausschließlich durch das Rosselandmittel κ_R ausgedrückt.

3.2.5 Chemie im vertikalen Modell

Die Berechnung der Gas- und Staubchemie im vertikalen Modell erfolgt auf die gleiche Weise wie im radialen Modell (siehe Abschnitt 2.3). Im Einzelnen werden bei gegebener

Temperatur und Dichte die Partialdrücke der unterschiedlichen Gasspezies sowie die Kondensationsgrade der Schlüsselelemente in die Kondensate abhängig von der Höhe z über der Scheiben-Mittelebene bestimmt. Diese Größen gehen in die Berechnung der Opazität des vertikalen Modells ein.

Der vertikale Transport ist im Rahmen des 1+1-dimensionalen Modells nicht berücksichtigt. Die Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit, $f_{\mathrm{cry,for}}$ bzw. $f_{\mathrm{cry,ens}}$, sowie der Kondensationsgrad von Kohlenstoff in Kohlenstoffstaub, f_{car}, werden vereinfachend vertikal konstant gesetzt. Mit anderen Worten besitzen diese Größen bei einer radialen Entfernung r in jeder Höhe z den Wert, der mit Hilfe des Einzonenmodells bei r unter Berücksichtigung des rein radialen Transports berechnet wird.

3.3 Die vertikalen Scheibengleichungen im Überblick

Die Gleichungen für die Bestimmung des vertikalen Aufbaus der Scheibe im Rahmen der 1+1-dimensionalen Näherung sind im Einzelnen:

Isotherme Schallgeschwindigkeit (siehe Glg. (2.2.15) bzw. (2.6.4)):

$$c_{\mathrm{s}} = \sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}} T_z}{\mu m_{\mathrm{H}}}} \ . \tag{3.3.1}$$

Dichte (siehe Glg. (2.2.14)):

$$\rho = \frac{P_z}{c_{\mathrm{s}}^2} \ . \tag{3.3.2}$$

Druckschichtung (siehe Glg. (3.2.4)):

$$\frac{\partial P_z}{\partial z} = -\Omega^2 \rho \, z - 4\pi G \rho \, \sigma_z \ . \tag{3.3.3}$$

Flächendichte (siehe Glg. (3.2.3)):

$$\frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \rho \ . \tag{3.3.4}$$

Energiefluß (siehe Glg. (3.2.5)):

$$\frac{\partial F_z}{\partial z} = \frac{9}{4} \Omega^2 \nu \rho \ . \tag{3.3.5}$$

Mittleres Molekulargewicht (siehe Glg. (2.3.35) bzw. (2.6.7)):

$$\mu = \frac{\rho \, k_{\mathrm{B}} T_z}{m_{\mathrm{H}} (p_{\mathrm{H}} + p_{\mathrm{H_2}} + p_{\mathrm{He}})} \ . \tag{3.3.6}$$

Rosselandmittel des Massenextinktionskoeffizienten (siehe Glgen. (2.6.8) – (2.6.11)):

$$\kappa_{\mathrm{R,for}} = f_{\mathrm{cry,for}} \kappa_{\mathrm{R,for,cry}} + \left(1 - f_{\mathrm{cry,for}}\right) \kappa_{\mathrm{R,sil,am}} \ , \tag{3.3.7}$$

$$\kappa_{\mathrm{R,ens}} = f_{\mathrm{cry,ens}} \kappa_{\mathrm{R,ens,cry}} + \left(1 - f_{\mathrm{cry,ens}}\right) \kappa_{\mathrm{R,sil,am}} \ , \tag{3.3.8}$$

$$\kappa_{\mathrm{R,dust}} = f_{\mathrm{car}} \kappa_{\mathrm{R,car}} + f_{\mathrm{ens}} \kappa_{\mathrm{R,ens}} + f_{\mathrm{for}} \kappa_{\mathrm{R,for}} + f_{\mathrm{iro}} \kappa_{\mathrm{R,iro}} + f_{\mathrm{cor}} \kappa_{\mathrm{R,cor}} \ , \tag{3.3.9}$$

$$\kappa_{\mathrm{R}} = f_{\mathrm{ice}} \kappa_{\mathrm{R,ice}} + \left(1 - f_{\mathrm{ice}}\right) \kappa_{\mathrm{R,dust}} + \left(1 - f_{\mathrm{cor}}\right) \kappa_{\mathrm{mol}} \ . \tag{3.3.10}$$

Temperaturschichtung (siehe Glg. (3.2.6)):

$$\frac{\partial T_z}{\partial z} = -\frac{3}{16} \frac{\kappa_{\mathrm{R}} \, \rho \, F_z}{\sigma T_z^3} \ . \tag{3.3.11}$$

Der Satz von Glgen. (3.3.1) – (3.3.11) beschreibt den vertikalen Aufbau der Scheibe im Rahmen der 1+1-dimensionalen Näherung. Das Verfahren der Lösung dieses Gleichnungssatzes wird im folgenden Abschnitt dargestellt.

3.4 Numerische Behandlung des vertikalen Modells

Beim Satz von Gleichungen für die vertikale Scheibenstruktur (3.3.1) – (3.3.11) handelt es sich um ein gekoppeltes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung. Es erfordert zur Lösung die Vorgabe von geeigneten Randwerten.

3.4.1 Randwerte im vertikalen Modell

Der Satz von Gleichungen (3.3.1) – (3.3.11) enthält vier gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung. Es sind dies die Gleichungen für den Druck P_z (3.3.3), die Flächendichte σ_z (3.3.4), den Energiefluß F_z (3.3.5) und die Temperatur T_z (3.3.11). Dementsprechend sind zur Lösung vier Randwerte P_0, σ_0, F_0 und T_0 vorzugeben.

Temperatur T_0 Die Temperatur in der Mittelebene der Scheibe ist zunächst unbekannt. Werte von Größen in der Mittelebene, die aus dem radialen Scheibenmodell berechnet wurden, dürfen nicht als Randwerte für die Berechnung der vertikalen Struktur verwendet werden, da die Einzonennäherung nur näherungsweise die Struktur der Scheiben-Mittelebene wiedergibt.

Dem gegenüber läßt sich die Temperatur an der Oberfläche der Scheibe spezifizieren. Die Scheiben-Oberfläche im vertikalen Modell wird als die Höhe z_0 über der Mittelebene definiert, bei der die vertikale optische Tiefe τ auf nahezu Null abgefallen ist (nicht zu verwechseln mit der Dichteskalenhöhe h_{s}). Nach der Eddington-Barbier-Approximation für die Temperaturschichtung (Glg. (2.2.25)) gilt, falls $\tau = 0$ gesetzt und die Heizung durch die Molekülwolke berücksichtigt wird,

$$T_0^4 = \frac{1}{2} T_{\mathrm{eff}}^4 + T_{\mathrm{cloud}}^4 \ . \tag{3.4.1}$$

T_{eff} ist aus dem radialen Modell bekannt (Glg. (2.2.24)). Glg. (3.4.1) bestimmt die Temperatur an der Scheiben-Oberfläche, T_0.

Flächendichte σ_0 Die Gesamt-Flächendichte Σ ist als globale Größe bei jeder radialen Distanz r bekannt. Allerdings ist die Vorgabe von $\sigma(\infty) = \frac{\Sigma}{2}$ (siehe Glg. (3.2.2)) als Randwert für die Flächendichte an der Oberfläche der Scheibe ungeeignet, da $\sigma(\infty)$ per Definition erst bei $z \to \infty$ erreicht wird. Es wird daher ein geringfügig kleinerer Wert als $\sigma(\infty)$ als Randwert vorgegeben. Im Modell ist

$$\sigma_0 = \frac{1}{2}\left(1 - 1{\cdot}10^{-6}\right)\Sigma \tag{3.4.2}$$

gesetzt. Dies ist der Wert der Flächendichte bei z_0.

Energiefluß F_0 Der Randwert für den Energiefluß ist nach Glg. (2.2.22) für die viskose Dissipationsrate gegeben durch

$$F_0 = \frac{9}{4}\Omega^2 \nu\, \sigma_0\ . \tag{3.4.3}$$

Druck P_0 Der Druck bei z_0 ist zunächst unbestimmt. Laut Glg. (2.2.19) gilt für die isotherme Druckschichtung

$$P(z) = P_{\rm c}\, e^{-\frac{\Omega^2}{2c_{\rm s}^2} z^2 - \frac{4\pi G \sigma_z}{c_{\rm s}^2} z}\ . \tag{3.4.4}$$

Um $P_0 = P(z_0)$ zu bestimmen, muß also der Druck in der Mittelebene der Scheibe, $P_{\rm c}$, ermittelt werden. Zu diesem Zweck wird Glg. (3.4.4) in Glg. (3.2.1) eingesetzt und die Integration über z ausgeführt. Das Ergebnis liefert einen Ausdruck für $P_{\rm c}$, mit dessen Hilfe schließlich der Druck an der Oberfläche der Scheibe bestimmt werden kann. Insgesamt erhält man

$$P_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{c_0^2\,\sigma_0}{h_0}\frac{1}{[1-\Phi(x_0)]}\,e^{-x_0^2} \tag{3.4.5}$$

mit

$$x_0 = \frac{2\pi G\,\sigma_0\,h_0}{c_0^2} + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{z}{h_0}\ , \tag{3.4.6}$$

$$h_0 = \frac{c_0}{\Omega}\ , \tag{3.4.7}$$

$$c_0 = \sqrt{\frac{k_{\rm B}T_0}{\mu_0 m_{\rm H}}}\ . \tag{3.4.8}$$

Φ stellt die Fehlerfunktion und μ_0 das mittlere Molekulargewicht bei z_0 dar. Es wird $\mu_0 = \frac{7}{3}$ gesetzt. Die Winkelgeschwindigkeit Ω in Glg. (3.4.7) wird als vertikal konstant angenommen. Für die Berechnung der Fehlerfunktion im Modell sei auf Anhang A.3 verwiesen.

3.4.2 Lösungsverfahren für die vertikale Struktur

Nach Vorgabe der Randwerte läßt sich nun das gekoppelte System von gewöhnlichen Differentialgleichungen 1. Ordnung (3.3.1) – (3.3.11) mit einem geeigneten numerischen Verfahren integrieren. Als Löser wurde ein Runge-Kutta-Verfahren 5. Ordnung gewählt (Press et al. 1992). Dabei bedeutet Genauigkeit 5. Ordnung, daß der Fehler, der bei der Berechnung der partiellen Ableitungen auftritt, proportional zur 6. Potenz der Schrittweite Δz ist.

Das Runge-Kutta-Verfahren 5. Ordnung besitzt gegenüber anderen Verfahren zwei wichtige Vorteile:

Zum einen weist dieses Verfahren eine hohe Genauigkeit auf. Dies ist insbesondere bei *steifen* Problemen essentiell, um eine ausreichende Genauigkeit der Lösung zu gewährleisten. Ein System von Gleichungen heißt steif, wenn sich dessen abhängige Variablen auf zwei oder mehr sehr unterschiedlichen Skalen der unabhängigen Variable verändern (Press et al. 1992). Das Gleichungssystem für die vertikale Struktur der Scheibe (3.3.1) – (3.3.11) stellt ein relativ steifes System von Gleichungen dar. Die Opazität kann sich innerhalb relativ kleiner Raumbereiche, z.B. in der Zone der Staubverdampfung, deutlich verändern, während andere Größen wie die Dichte oder die Temperatur eher auf globaler Skala bzw. in geringerem Ausmaß als die Opazität variieren.

Zum anderen besitzt das Runge-Kutta-Verfahren 5. Ordnung den Vorteil gegenüber anderen Verfahren, daß die Schrittweite Δz automatisch angepaßt wird. Die Schrittweite wird verringert, sobald sich zwischen zwei aufeinanderfolgenden Schritten mindestens eine der abhängigen Variablen zu stark ändert. Hingegen wird sie vergrößert, falls die abhängigen Variablen nur geringfügig variieren. Auf diese Weise wird die Anzahl der Gitterpunkte in vertikaler Richtung im Modell gering gehalten. Bei Verfahren ohne automatische Schrittweiten-Anpassung ist dagegen die Schrittweite Δz von vornherein so klein zu wählen, daß die Bereiche, in denen die abhängigen Variablen große Gradienten aufweisen, mit ausreichender Genauigkeit aufgelöst werden. Die Konsequenz bei solchen Verfahren ist eine wesentlich größere Anzahl von Gitterpunkten im Vergleich zu Verfahren mit automatischer Schrittweiten-Steuerung.

Eine möglichst geringe Zahl von vertikalen Gitterpunkten ist für das $1{+}1$-dimensionale Modell wünschenswert, um die Rechendauer der Modelle mit 2-dimensionalem Tracer-Transport gering zu halten, welche auf der Basis der $1{+}1$-dimensionalen Scheibenstruktur berechnet werden. Solche Modelle werden in Kapitel 4 behandelt.

Der Satz von vertikalen Gleichungen (3.3.1) – (3.3.11) wird mit Hilfe des Runge-Kutta-Verfahren 5. Ordnung bis zu einer Genauigkeit von 10^{-6} gelöst.

Schießverfahren Die Berechnung der vertikalen Scheibenstruktur läuft wie folgt ab:

Zuerst wird die Lösung am oberen Rand z_0 bestimmt, d.h. die Randwerte gemäß Abschnitt 3.4.1 berechnet. Als Startwert für den oberen Rand wird $z_0 = 3.5\,h_\mathrm{s}$ gewählt.

Darauf folgend werden die vertikalen Scheibengleichungen sukzessiv bis zur Scheiben-Mittelebene ($z = 0$) gelöst.

Gemäß der Definition der Flächendichte-Variable σ (Glg. (3.2.1)) muß bei $z = 0$ ebenfalls $\sigma = 0$ gelten. Dies ist nach sukzessiver Lösung der vertikalen Scheibengleichungen (3.3.1) – (3.3.11) bis zur Mittelebene i. A. nicht der Fall, sondern man erhält einen Wert $\sigma(z = 0) \neq 0$. In diesem Fall werden die vertikalen Scheibengleichungen (3.3.1) – (3.3.11) mit einem neuen Wert für z_0 erneut gelöst. Dies wird so oft wiederholt, bis man zwei Werte für z_0 gefunden hat, für die $\sigma(z = 0) \geq 0$ bzw. $\sigma(z = 0) < 0$ gilt. Die Lage der Scheiben-Oberfläche z_0 wird daraufhin mittels einer Intervall-Schachtelung bis auf eine Genauigkeit von $5{\cdot}10^{-5}$ bestimmt.

Mit Hilfe dieses Schießverfahrens in der Variablen z_0 ist die Forderung $\sigma(z = 0) = 0$ an die Flächendichte in der Mittelebene mit hinreichender Genauigkeit erfüllt und somit die vertikale Struktur der Scheibe berechnet.

Tabelle 3.5.1: Modellrechnungen in der 1+1-dimensionalen Näherung.

Modell	Beschreibung
1+1DB0A	Modell 1DB0A mit vertikaler Struktur (Modell ohne Annealing)
1+1DBS	Standardmodell 1DBS mit vertikaler Struktur

1+1D-Scheibenstruktur Die beschriebene Vorgehensweise wird an jedem radialen Punkt r_k, $k = 1 \ldots K$, wiederholt. Auf diese Weise wird die zweidimensionale Struktur der Scheibe in der 1+1-dimensionalen Näherung bestimmt.

Die Berechnung der vertikalen Struktur der Scheibe kann zu beliebigen Zeitpunkten der Entwicklung der Scheibe als Zusatz zum zeitabhängigen radialen Modell erfolgen. Mit anderen Worten ist es nicht notwendig, zu jedem Zeitpunkt die vertikale Struktur der Scheibe zu berechnen, solange globale, 2-dimensionale Prozesse, wie z.B. der 2-dimensionale Tracer-Transport, im Modell nicht berücksichtigt werden. Für Scheibenmodelle in der 1+1-dimensionalen Näherung, die den 2-dimensionalen Tracer-Transport berücksichtigen, sei nochmals auf Kapitel 4 verwiesen.

3.5 Ergebnisse der Berechnung der vertikalen Struktur

Die Modellrechnungen, die im Rahmen der 1+1-dimensionalen Näherung durchgeführt worden sind, sind in Tab. 3.5.1 aufgeführt. Es sind dies die Scheibenmodelle 1DBS und 1DB0A der Einzonennäherung, deren vertikale Struktur jeweils zusätzlich aufgelöst wurde (vergl. Tab. 2.8.1). Es werden also die Modelle 1+1DBS (Standardmodell mit Annealing) und 1+1DB0A (Modell ohne Annealing) miteinander verglichen.

Das 1+1-dimensionale Modell dient im Rahmen dieser Arbeit als Grundlage für die Berechnung des 2-dimensionalen Tracer-Transports (siehe Kapitel 4). Es werden daher in diesem Abschnitt lediglich die wichtigsten Aspekte des vertikalen Modells dargestellt. Für eine eingehendere Diskussion der vertikalen Scheibenstruktur wird auf Abschnitt 4.4 verwiesen.

3.5.1 1+1-dimensionales Gitter

Um einen Eindruck vom 1+1-dimensionalen Gitter zu gewinnen, ist dieses in Abb. 3.5.1 für das Modell 1+1DBS zum Zeitpunkt $t = 0$ dargestellt. Die Abbildung beschränkt sich dabei auf die inneren $0.8\,\mathrm{AU}$ der Scheibe.

Es läßt sich deutlich erkennen, daß die Stützstellen des vertikalen Gitters unregelmäßig angeordnet sind. Dies hat seine Ursache im Lösungsverfahren für die vertikalen Aufbaugleichungen, das mit einer automatischen Steuerung der Schrittweite ausgestattet ist (siehe Abschnitt 3.4.2). Dieses Verfahren führt dazu, daß in Bereichen, in denen die physikalischen Größen große Gradienten aufweisen, die Schrittweite Δz verkleinert wird und somit diese Bereiche besser aufgelöst werden.

Eine hohe Gitterpunktdichte tritt zum einen am oberen Rand des vertikalen Gitters auf (Abb. 3.5.1). Dort fallen Dichte und Druck nach außen hin stark ab, so daß dort sehr kleine Δz gewählt werden. Darüber hinaus wird in den schmalen Zonen der Staubprozessierung und Eissublimation die Auflösung des Gitters vergrößert, weil sich dort Temperatur

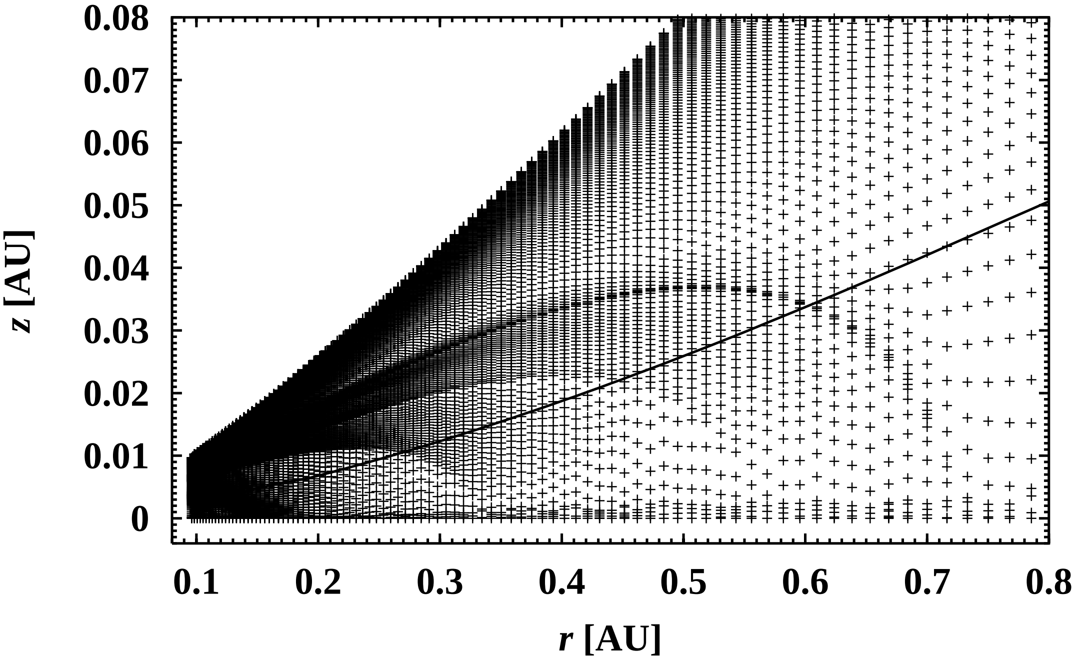


Abbildung 3.5.1: 1+1-dimensionales Gitter des Standardmodells 1DBS zum Zeitpunkt $t = 0$ im inneren Bereich der Scheibe. Jedes Kreuz markiert einen Gitterpunkt. Die durchgezogene Linie stellt den radialen Verlauf der Druckskalenhöhe h_s aus dem Einzonenmodell dar.

und Opazität stark verändern. Dadurch bilden sich bogenartige Strukturen im (r, z)-Gitter mit erhöhter Gitterpunktdichte aus, die sich von den Gebieten mit geringerer Auflösung des z-Gitters abheben. Beispielsweise ist die bogenartige Struktur in Abb. 3.5.1, die bis in eine Höhe von $\sim 0.035\,\mathrm{AU}$ reicht, auf die Transformation von Enstatit zu Forsterit zurückzuführen. Die beiden Bögen unterhalb davon werden durch die Verdampfung von Forsterit und Eisen hervorgerufen.

Abb. 3.5.1 zeigt auch den radialen Verlauf der Dichteskalenhöhe h_s aus dem Einzonenmodell (durchgezogene Linie). Infolge der Wahl (3.4.2) für die Flächendichte am oberen Rand z_0 des vertikalen Gitters, befindet sich z_0 überall in der Scheibe bei mehreren lokalen Dichteskalenhöhen. In den inneren Scheibenbereichen gilt typischerweise $z_0 \approx (3 \ldots 4)\, h_s$, während in dem Bereich, in dem die Scheibe vertikal selbstgravitierend ist, $z_0 > 10\, h_s$ werden kann.

Die maximale Gitterpunktzahl des vertikalen Gitters wird in den $1+1$-dimensionalen Modellen nahe des Innenrandes erreicht und beträgt 170 im Modell 1+1DBS zum Zeitpunkt $t = 0$. Die minimale Gitterpunktzahl des vertikalen Gitters wird dagegen im chemisch inaktiven Außenbereich durchlaufen und beläuft sich im Modell 1+1DBS zum Zeitpunkt $t = 0$ auf 90. Alles in allem wird die $1+1$-dimensionale Struktur der Scheibe an $\sim 35\,000$ Gitterpunkten bestimmt. Dieser Wert ändert sich im Laufe der Scheibensimulation nur wenig.

3.5.2 Dichte- und Temperaturstruktur

In Abb. 3.5.2 ist der vertikale Verlauf (a) der Dichte ρ_z und (b) der Temperatur T_z im Standardmodell 1+1DBS nach $10^5\,\mathrm{a}$ bei unterschiedlichen radialen Entfernungen r dar-

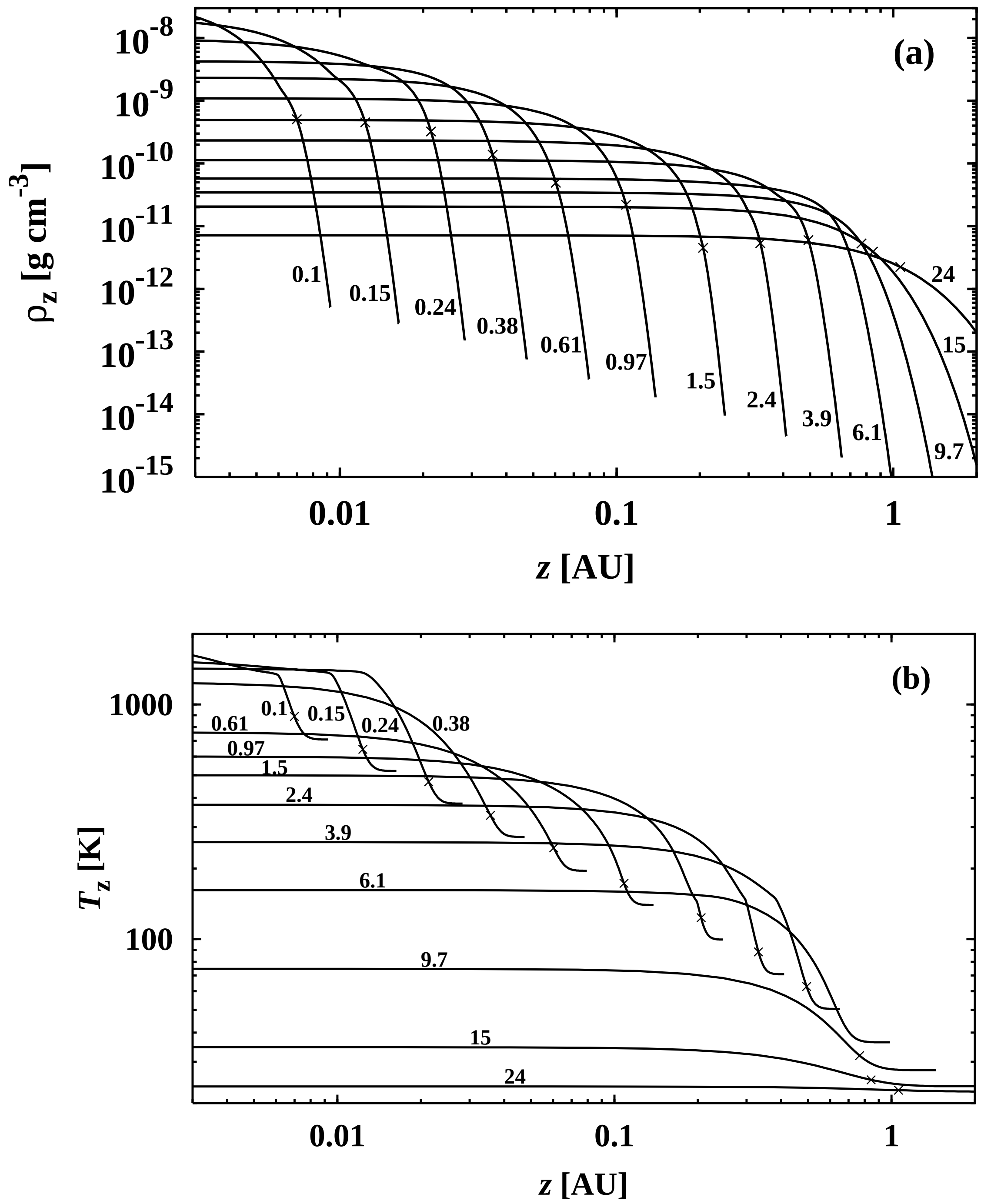


Abbildung 3.5.2: Vertikale Struktur der Scheiben im Standardmodell 1+1DBS nach 10^5 a bei verschiedenen radialen Abständen r, die in Einheiten von AU angegeben sind. **(a)** Dichte ρ_z. **(b)** Temperatur T_z. Die Höhe über der Mittelebene, bei der die Scheibe vertikal optisch dünn wird, ist mit einem Kreuz markiert.

gestellt.

Die Dichte weist in vertikaler Richtung einen relativ glatten Verlauf auf, da sie nur unwesentlich von Veränderungen in der chemischen Zusammensetzung der Scheibenmaterie beeinflußt wird (Abb. 3.5.2(a)). Im wesentlichen ist die vertikale Schichtung hydrostatisch. Lediglich im selbstgravitierenden Bereich der Scheibe weicht sie davon ab. Dort ist die vertikale Struktur kompakter, d.h. die Dichte nahe der Mittelebene ist größer als in einer rein hydrostatischen Schichtung. Am oberen Rand des Rechengebietes ist ρ_z gegenüber der Mittelebene um typischerweise 4 Zehnerpotenzen abgefallen.

Im Vergleich zur Dichte zeigt die Temperatur einen unregelmäßigeren vertikalen Verlauf (Abb. 3.5.2(b)). Dies ist auf die Prozessierung des Staubs zurückzuführen. In Regionen, in denen wichtige Absorber vernichtet werden (z.B. durch Verdampfen), fällt die Opazität und bewirkt einen flacheren Temperaturgradienten als in Regionen mit konstanter Opazität.

In Abbildungen 3.5.2(a) und (b) ist zusätzlich die vertikale Position markiert, bei der – bei gegebenem radialen Abstand r – die Schichtung optisch dünn wird. Der Übergang $\tau = 1$ wird in den chemisch aktiven Scheibenregionen erst nahe von z_0 erreicht, d.h. die optisch dicken Regionen sind im Rechengebiet vollständig enthalten. Etwas oberhalb von $\tau = 1$ wird die Schichtung vertikal isotherm, wie es für optisch dünne Regionen zu erwarten ist. Dort, wo Staub existiert, erhält man Werte für die vertikale optische Tiefe bis zur Mittelebene von $\sim 100 \ldots 1\,000$.

3.5.3 Opazitätsstruktur

Um zu verdeutlichen, wie die unterschiedlichen Staubspezies vertikal verteilt sind, ist in Abb. 3.5.3 die vertikale Opazitätsstruktur im Modell 1+1DBS nach $10^5\,\mathrm{a}$ für zwei radiale Abstände r dargestellt. Dies sind (a) $r = 0.098\,\mathrm{AU}$ und (b) $r = 1.53\,\mathrm{AU}$.

Die Temperaturen in der Mittelebene und am oberen Rand bei $0.098\,\mathrm{AU}$ im Modell 1+1DBS nach $10^5\,\mathrm{a}$ betragen $1\,754$ bzw. $699\,\mathrm{K}$. Die entsprechenden Werte bei $1.53\,\mathrm{AU}$ sind 499 bzw. $99.6\,\mathrm{K}$. Damit ist in Abb. 3.5.3 der Temperaturbereich abgedeckt, in dem sich die Staubprozessierung im wesentlichen abspielt.

Bei $r = 0.098\,\mathrm{AU}$ beginnt Korund nahe der Scheiben-Mittelebene zu verdampfen (Abb. 3.5.3(a)). Die Opazität wird hier von den Molekülen mitbestimmt. Geht man nun zu größeren Höhen z hin, so kondensiert zunächst Eisen bei $\sim 1\,380\,\mathrm{K}$ und dann Forsterit bei $\sim 1\,350\,\mathrm{K}$. Schließlich wird bei $\sim 1\,280\,\mathrm{K}$ der größte Teil des Forsterits in Enstatit transformiert, so daß am oberen Rand $\sim 92\,\%$ des Siliziums in Enstatit und $\sim 8\,\%$ in Forsterit gebunden sind (vergl. Glg. (2.8.1) und Diskussion in Abschnitt 2.8.5). Kohlenstoffstaub liegt bei $0.098\,\mathrm{AU}$ nicht vor, da dieser dort im radialen Einzonenmodell vollständig verbrannt ist ($f_\mathrm{car} = 0$) und f_car im Rahmen des 1+1-dimensionalen Modells vertikal konstant gesetzt wird. Da die Silikate im radialen Einzonenmodell vollständig kristallisiert sind, gilt aus dem gleichen Grund $f_\mathrm{cry,for} = f_\mathrm{cry,ens} = 1$ für alle z.

Bei $r = 1.53\,\mathrm{AU}$ ergibt sich folgendes Bild (Abb. 3.5.3(b)): In einer Höhe von $\sim 0.2\,\mathrm{AU}$ kondensiert Eis auf die Staubteilchen bei einer Temperatur von $\sim 145\,\mathrm{K}$, so daß am oberen Rand $f_\mathrm{ice} = 1$ gilt. Im Gegensatz dazu sind die Kondensationsgrade der übrigen Kondensate für die gesamte vertikale Schichtung konstant, weil die Temperaturen in der Schichtung für die Prozessierung des Staubs zu niedrig sind ($T_\mathrm{z} < 500\,\mathrm{K}$). Im Einzelnen erhält man die Werte $f_\mathrm{cor} = 1$, $f_\mathrm{iro} = 1$, $f_\mathrm{car} = 0.33$, $f_\mathrm{cry,for} = 0.73$ sowie $f_\mathrm{cry,ens} = 0.67$. Die Werte für f_car, $f_\mathrm{cry,for}$ und $f_\mathrm{cry,ens}$ sind wiederum jene, die durch das radiale Einzonenmodell bei $r = 1.53\,\mathrm{AU}$ bestimmt wurden.

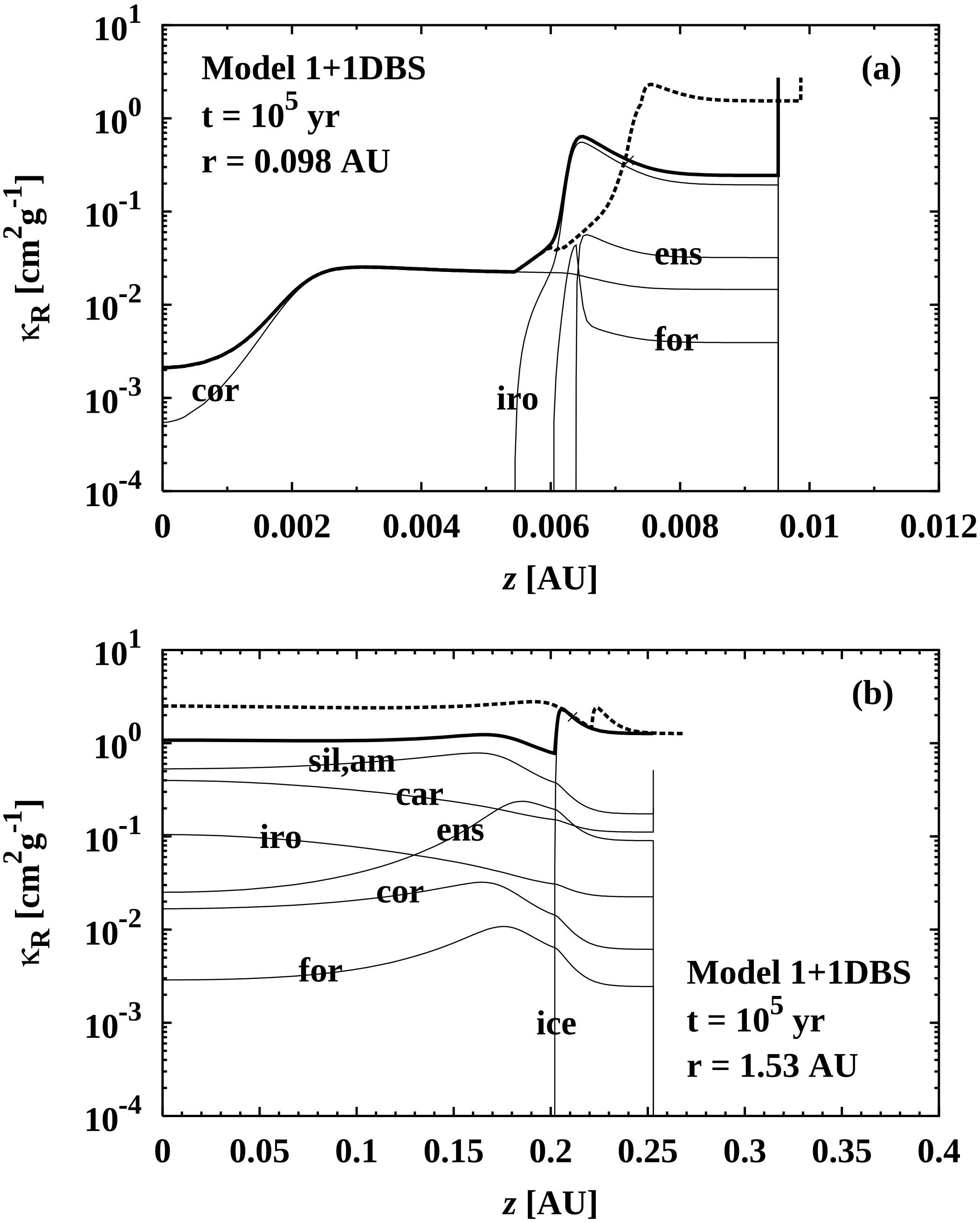


Abbildung 3.5.3: Vertikaler Verlauf des Rosselandmittels des Massenextinktionskoeffizienten κ_{R} der Scheibenmaterie insgesamt (dicke, durchgezogene Linie) und der individuellen Absorber (dünne, durchgezogene Linien) im Standardmodell 1+1DBS nach 10^5 a. **(a)** Bei $r = 0.098$ AU. **(a)** Bei $r = 1.53$ AU. Aufgetragen ist ebenfalls κ_{R} im Modell 1+1DB0A nach 10^5 a (dicke, gestrichelte Linie). Die Höhe über der Mittelebene, bei der die Scheibe vertikal optisch dünn wird, ist mit einem Kreuz markiert. Die vertikalen Linien am rechtsseitigen Ende der Kurven sind ein Artefakt der oberen Randbedingung, wo $f_{\mathrm{cry,for}} = f_{\mathrm{cry,ens}} = 0$ und $f_{\mathrm{car}} = 0.6$ gesetzt wurde.

Man beachte, daß bei konstantem Kondensationsgrad einer Spezies nicht auch die Opazität dieser Spezies konstant ist (Abb. 3.5.3(b)). Dies hat seine Ursache in der Temperatur-abhängigkeit, welche die $\kappa_{\rm R}$ der individuellen Absorber aufweisen (vergl. Anhang A.2).

Die Verdampfungs-Temperaturen der Kondensate im vertikalen Modell sind mit wenigen Ausnahmen niedriger als im radialen Einzonenmodell. Dies liegt daran, daß die Kondensations-Sequenz im vertikalen Modell bei niedrigeren Drücken durchlaufen wird. Beispielsweise kondensiert Eis im vertikalen Modell bei $\sim 145\,{\rm K}$, während dies im radialen Modell bei $\sim 154\,{\rm K}$ geschieht.

In diesem Zusammenhang sei bemerkt, daß das Modell auf der Annahme basiert, daß die Staubteilchen bis in beliebige Höhen gemischt werden können. Dies erfordert, daß die Staubteilchen überall an die Bewegung des Scheibengases koppeln. Dies dürfte jedoch in großer Höhe über der Mittelebene nicht mehr der Fall sein, wenn die Dichte zu niedrige Werte annimmt. Allerdings hat diese Annahme kaum Auswirkungen auf die Scheibenstruktur in der Mittelebene, wo die Scheibe chemisch am aktivsten ist.

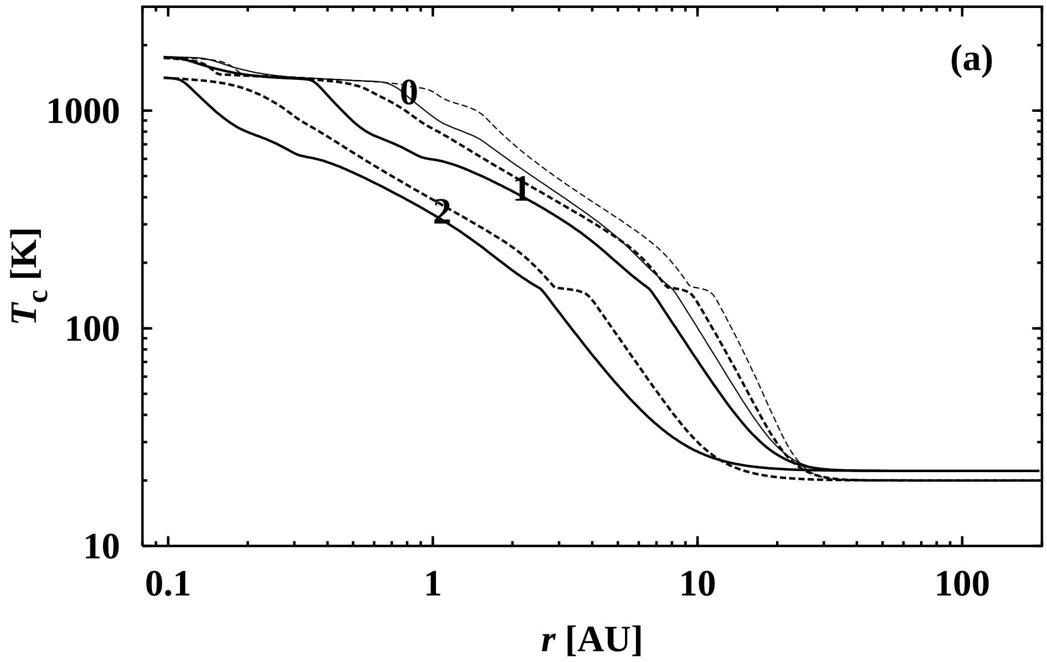
Schließlich zeigt Abb. 3.5.3 zusätzlich den vertikalen Verlauf von $\kappa_{\rm R}$ im Modell 1+1DB0A (dicke, gestrichelte Linie) für den gegebenen Zeitpunkt und die gegebenen radialen Positionen. Die ausschließlich amorphen Silikate im Modell 1+1DB0A sorgen dafür, daß die Opazität im Bereich der Existenz der Silikate gegenüber dem Modell 1+1DBS vergrößert ist. Das hat zur Folge, daß die Scheibe im Modell 1+1DB0A heißer und dichter als im Modell 1+1DBS ist. Aus diesem Grund befinden sich die Kondensationsfronten von Eisen und Wassereis im Modell 1+1DB0A verglichen mit dem Modell 1+1DBS in größerer Höhe. Dies gilt ebenfalls für die vertikale Ausdehnung des Rechengebiets und verdeutlicht nochmals, daß das Lösungsverfahren für die vertikale Scheibenstruktur ein variables Gitter in z-Richtung erzeugt.

3.5.4 Struktur in der Mittelebene

In Abb. 3.5.4 soll schließlich die Struktur in der Scheiben-Mittelebene verglichen werden, die einerseits aus dem Standardmodell 1DBS in der Einzonennäherung (gestrichelte Linie) und andererseits aus dem $1+1$-dimensionalen Standardmodell 1+1DBS (durchgezogene Linien) folgt. Aufgetragen sind die radialen Verläufe (a) der Zentral-Temperatur $T_{\rm c}$ und (b) der Zentral-Dichte $\rho_{\rm m}$ zu den Entwicklungszeiten $t = 0$, 10^5 und $10^6\,{\rm a}$.

Es zeigt sich, daß sich die radialen Strukturen der beiden Modelle deutlich voneinander unterscheiden. Die Zentral-Temperatur (Abb. 3.5.4(a)) weist z.B. nach $10^5\,{\rm a}$ eine maximale Differenz zwischen den Modellen von $453\,{\rm K}$ bei $r = 0.55\,{\rm AU}$ auf! Dabei ist die Mittelebene im Modell 1+1DBS in weiten Bereichen der Scheibe kühler als im Modell 1DBS. Dies liegt darin begründet, daß im radialen Modell mit vertikal gemittelten Größen gerechnet wird. Insbesondere führt die z-Abhängigkeit der Dichte im vertikalen Modell dazu, daß die Energieproduktion durch Akkretion mit der Höhe abnimmt (vergl. Glg. (3.3.5)). Daher steigt die Temperatur im vertikalen Modell vom oberen Scheibenrand bis zur Mittelebene hin nicht stark genug an, um den Wert der Zentral-Temperatur des radialen Einzonenmodells zu erreichen. Zudem ist die Opazität im vertikalen Modell nicht konstant (siehe Abb. 3.5.3).

Die radialen Verläufe der Zentral-Dichte in den beiden Modellen (Abb. 3.5.4(b)) weichen ähnlich stark voneinander ab wie die radialen Verläufe der Zentral-Temperatur. Die Veränderung der Dichte ist jedoch nicht so gravierend für die chemische Zusammensetzung der Scheibenmaterie wie eine Veränderung der Temperatur. Die Zentral-Dichte im Modell 1+1DBS ist in den meisten Bereichen kleiner als im Modell 1DBS, maximal um



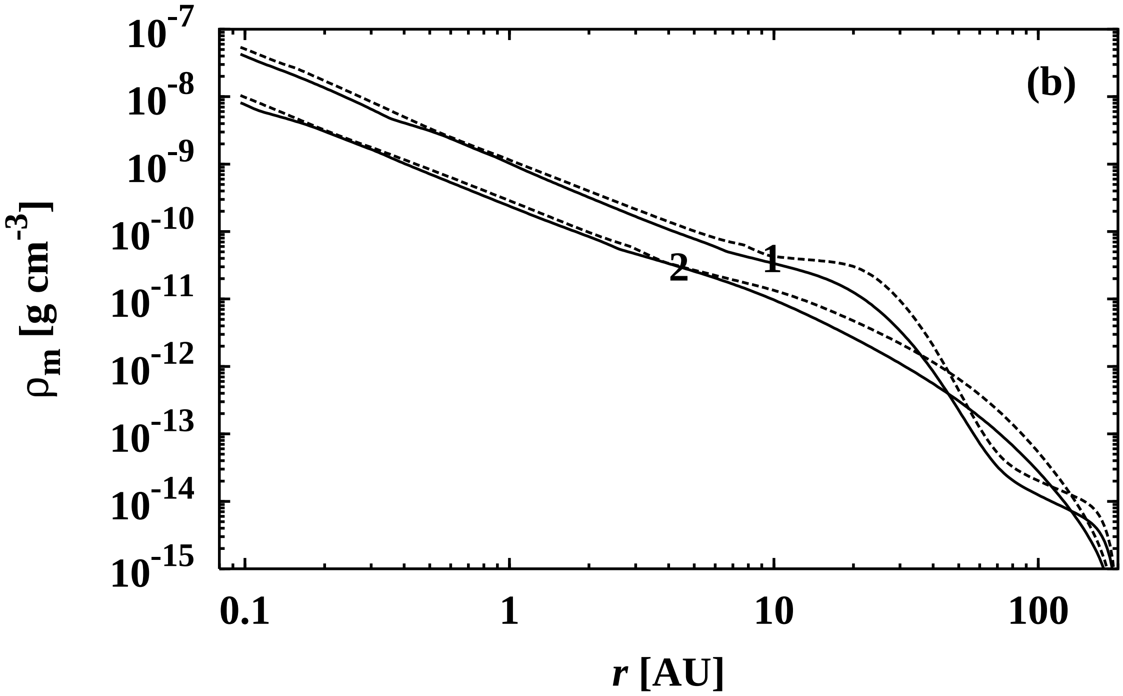


Abbildung 3.5.4: Struktur der Scheiben-Mittelebene im 1+1-dimensionalen Standardmodell 1+1DBS (durchgezogene Linien) und im Standard-Einzonenmodell 1DBS (gestrichelte Linie) nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2). **(a)** Zentral-Temperatur T_c. **(b)** Zentral-Dichte ρ_m. Das Anfangsmodell für die Dichte ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

einen Faktor von beinahe 3 im selbstgravitierenden Bereich der Scheibe ($r \approx 25\,\mathrm{AU}$). Dies liegt maßgeblich an der Berechnung der Dichte im Einzonenmodell gemäß Glg. (2.6.6), wodurch die Scheibe in vertikaler Richtung zu stark komprimiert wird. Darüber hinaus wird der Einfluß der Selbstgravitation im Einzonenmodell offenbar überschätzt (vergl. Glgen. (2.2.18) und (3.2.4)).

Alles in allem zeigt Abb. 3.5.4 die Grenzen der Einzonennäherung auf. Die vertikale Mittelung der Größen in der Einzonennäherung führt zu unerwartet großen Abweichungen von der Struktur in der Mittelebene, wie sie aus dem vertikalen Modell folgt. Dies erweist sich als ein weiterer Grund, die Scheibenstruktur - wenn nicht exakt 2-dimensional - so doch zumindest in der $1+1$-dimensionalen Näherung zu bestimmen.

Kapitel 4

2-dimensionaler Stofftransport

In den Kapiteln 2 und 3 wurden das radiale und das vertikale Modell der protoplanetaren Scheibe beschrieben. Das radiale und das vertikale Scheibenmodell zusammen bestimmen die Struktur der Scheibe in der $1+1$-dimensionalen Näherung. Basierend auf der Scheibenstruktur in der $1+1$-dimensionalen Näherung wird im Folgenden der Transport von Tracern in der Scheibe in zwei Dimensionen (radial und vertikal) behandelt.

Die Behandlung des 2-dimensionalen Stofftransports in der Scheibe stellt das Kernstück der vorliegenden Arbeit dar.

4.1 Das Problem der Wahl geeigneter Koordinaten

4.1.1 Zylinder-Koordinaten

In Scheibenmodellen der $1+1$-dimensionalen Näherung werden die Aufbaugleichungen der Scheibe in Zylinder-Koordinaten (r, z) dargestellt. Daher liegt es nahe, auch den 2-dimensionalen Stofftransport in der Scheibe in Zylinder-Koordinaten zu behandeln.

Die Transport-Reaktions-Gleichung in 2D Zylinder-Koordinaten des Tracers j mit der Eigenschaft i ist gemäß Glg. (2.5.15) gegeben durch

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} + v_z \frac{\partial c_{i,j}}{\partial z} = \frac{1}{rn} \frac{\partial}{\partial r} rnD \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial z} nD \frac{\partial c_{i,j}}{\partial z} + \frac{R_{i,j}}{n} \,. \tag{4.1.1}$$

Die Geometrie, die im Falle der Wahl von Zylinder-Koordinaten für das 2-dimensionale Scheibenmodell folgt, ist in Abb. 4.1.1(a) dargestellt.

4.1.2 Polar-Koordinaten

Die dynamische Entwicklung des Gases in der protoplanetaren Akkretionsscheibe wird durch die Gleichungen der Strömungsmechanik beschrieben. Die Modellierung von hydrodynamischen Strömungen setzt die Kenntnis der Geometrie voraus, in der sich die Strömung befindet. Der obere (bzw. untere) Rand der Scheibe ist jedoch, wie dies allgemein bei Atmosphären der Fall ist, nicht eindeutig festgelegt. Man kann z.B. die Dichteskalenhöhe h_s der Scheibe oder aber die Höhe $z(\tau = 2/3)$, bei der die Scheibe nach

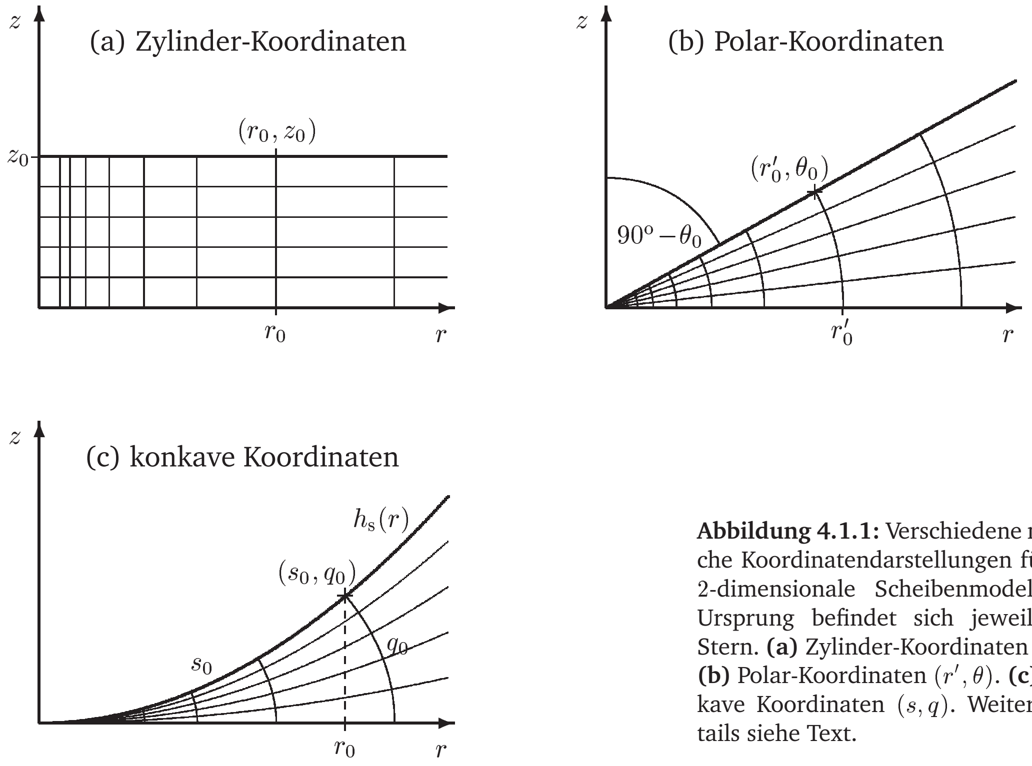


Abbildung 4.1.1: Verschiedene mögliche Koordinatendarstellungen für das 2-dimensionale Scheibenmodell. Im Ursprung befindet sich jeweils der Stern. **(a)** Zylinder-Koordinaten (r, z). **(b)** Polar-Koordinaten (r', θ). **(c)** Konkave Koordinaten (s, q). Weitere Details siehe Text.

der Eddington-Barbier-Approximation (2.2.25) den größten Teil ihrer Energie abstrahlt, verwenden, um den oberen Rand der Scheibe festzulegen.

Unabhängig davon, wie man den Oberrand der Scheibe definiert, zeigen Modellrechnungen, daß die Höhe der Scheibe i. A. mit dem Radius zunimmt (vergl. z.B. den Verlauf von h_s/r in Abb. 2.8.3(c)). Die Annahme, die Geometrie der Scheibe sei durch Zylinder-Koordinaten zu beschreiben, d.h. die Scheibe gleiche einer unendlichen Platte, ist lediglich eine vereinfachende Näherung. Vielmehr besitzt die Scheibe, wenn man einen Querschnitt in der (r, z)-Ebene betrachtet, eher die Gestalt eines sich nach innen verjüngenden Rohres. Die Scheibengeometrie scheint daher geeigneter durch Polar-Koordinaten als durch Zylinder-Koordinaten wiedergegeben zu werden (Abb. 4.1.1(b)).

Die Transport-Reaktions-Gleichung in 2-dimensionalen Polar-Koordinaten ist gegeben durch

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v'_r \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r'} + v_\theta \frac{1}{r'} \frac{\partial c_{i,j}}{\partial \theta} = \frac{1}{r'^2 n} \frac{\partial}{\partial r'} r'^2 n D \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r'} + \frac{1}{r'^2 n \cos\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \cos\theta \, n D \frac{\partial c_{i,j}}{\partial \theta} + \frac{R_{i,j}}{n} . \tag{4.1.2}$$

r' ist der Radius in Polar-Koordinaten, θ der von der Scheiben-Mittelebene an gemessene Polarwinkel, v'_r die radiale Driftgeschwindigkeit in Polar-Koordinaten und v_θ die Geschwindigkeit in θ-Richtung.

Die Wahl von 2-dimensionalen Polar-Koordinaten für die Beschreibung des Stofftransports im Rahmen von Scheibenmodellen in der 1+1-dimensionalen Näherung birgt jedoch in sich ein Problem. Es muß zwischen dem 1+1-dimensionalen zylindrischen Gitter, das die Scheibenstruktur (Dichte, Temperatur usw.) vorgibt, und dem 2-dimensionalen polaren

Gitter, auf welchem die Konzentrationen $c_{i,j}$ berechnet werden, interpoliert werden. Die Interpolation von Größen zwischen unterschiedlichen Gittern ist jedoch immer mit numerischen Fehlern behaftet.

Im Rahmen dieser Arbeit wird der Stofftransport dennoch in 2-dimensionalen Polar-Koordinaten berechnet. Zusätzlich soll durch die Berechnung von Modellen mit 1-dimensionalem radialen Stofftransport überprüft werden, welchen Einfluß die Geometrie der Scheibe auf den Stofftransport besitzt. Die Transport-Reaktions-Gleichung in 1-dimensionalen Polar-Koordinaten in der Scheiben-Mittelebene ($\theta = 0$, $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial \theta} = 0$) ist gegeben durch

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v_r' \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r'} = \frac{1}{r'^2 n} \frac{\partial}{\partial r'} r'^2 n D \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r'} + \frac{R_{i,j}}{n} \,. \tag{4.1.3}$$

Man beachte, daß sich die 1-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichungen in Zylinder- und Polar-Koordinaten (Glgen. 2.5.16 und 4.1.3) einzig in ihren Diffusionstermen unterscheiden (in der Mittelebene gilt $r = r'$). Dies ist auf die Darstellung der Scheibe mittels unterschiedlicher Geometrien zurückzuführen.

4.1.3 Konkave Koordinaten

Die Scheibenmodellierung zeigt, daß die Dichteskalenhöhe h_s keine lineare Funktion des Radius' ist, sondern sich der Öffnungswinkel zwischen der Scheiben-Mittelebene und der Scheiben-Oberfläche i. A. mit dem Abstand r vergrößert. Man spricht von einer ‚flaring disk', d.h. einer Scheibe, die sich nach außen hin aufweitet. In der Einzonennäherung folgt z.B. im stationären Fall, bei konstantem κ und unter Vernachlässigung der Selbstgravitation der Scheibe für die Dichteskalenhöhe $h_\mathrm{s} \propto r^{9/8}$.

Um der realen Scheibengeometrie besser zu entsprechen, kann man gemäß Abb. 4.1.1(c) Koordinaten der Form (s, q) einführen. Bei dieser Art von Koordinaten stellt s die Bogenlängen der Funktion $h_\mathrm{s}(r)$ vom Ursprung bis zu einem zylindrischen Radius r_0 dar. Die zweite Koordinate q wird mittels des Ellipsenbogens definiert, der $h_\mathrm{s}(r)$ senkrecht bei r_0 schneidet. q ist dann die Bogenlänge der Ellipse von der Mittelebene bis $h_\mathrm{s}(r_0)$. Die Koordinaten (s, q) bilden auf diese Weise ein orthogonales Gitter. Sie werden im Rahmen der Arbeit als ‚konkave' Koordinaten bezeichnet.

Die Behandlung des 2-dimensionalen Stofftransports in konkaven Koordinaten ist durchaus möglich. Jedoch lassen die Krümmungsterme, die in der Transport-Reaktions-Gleichung auftreten, die numerische Behandlung umständlich werden. Auf die Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung in konkaven Koordinaten wird hier aus diesem Grund verzichtet.

In der Einzonennäherung ist die numerische Behandlung des Stofftransports in konkaven Koordinaten allerdings unproblematisch. Man erhält für die radiale Transport-Reaktions-Gleichung in konkaven Koordinaten

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} = \frac{1}{r h_\mathrm{s}(r) n} \frac{\partial}{\partial r} r h_\mathrm{s}(r) n D \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} + \frac{R_{i,j}}{n} \,. \tag{4.1.4}$$

Unter den aufgeführten Koordinatendarstellungen kommt die konkave Geometrie der realen Geometrie von Scheiben am nächsten.

Die Auswirkungen auf die Ergebnisse von Scheibenmodellen, denen eine unterschiedliche Geometrie zugrunde liegt, werden in Abschnitt 4.4 diskutiert.

4.2 Der 2-dimensionale Stofftransport im Modell

Der 2-dimensionale Stofftransport wird im Modell in 2-dimensionalen Polar-Koordinaten behandelt. Es wird demzufolge die Transport-Reaktions-Gleichung in der Form (4.1.2) für die Berechnung des 2-dimensionalen Tracer-Transports verwendet. Die resultierenden Fehler, die bei der Interpolation zwischen dem 1+1-dimensionalen zylindrischen und dem 2-dimensionalen polaren Gitter auftreten, werden im Modell also in Kauf genommen, um die Scheibengeometrie realitätsgetreuer wiederzugeben. Das Verfahren der Interpolation zwischen den Gittern wird in Abschnitt 4.2.3 beschrieben.

4.2.1 Diskretisierung

2-dimensionales Gitter Die Polar-Koordinaten (r', θ) werden wie folgt diskretisiert:
Die radiale Koordinate r' wird auf die gleiche Weise wie die radiale Koordinate r in Zylinder-Koordinaten diskretisiert. r' wird also in ein logarithmisch äquidistantes Gitter mit 332 radialen Stützstellen r'_k (100 Stützstellen pro Dekade) zwischen dem Scheiben-Innenrand $r'_1 = 0.096\,\mathrm{AU}$ und dem Scheiben-Außenrand $r'_K = 200\,\mathrm{AU}$ aufgeteilt.
Die Diskretisierung der Winkel-Koordinate θ erfolgt in $L = 51$ äquidistante Stützstellen θ_l, $l = 1 \ldots L$, zwischen dem oberen Rand $\theta_1 = 4.01^\mathrm{o}$ und der Scheiben-Mittelebene $\theta_L = 0^\mathrm{o}$.
Die Scheibenstruktur im Rahmen des 2-dimensionalen Scheibenmodells ist, wie bereits angemerkt, durch das 1+1-dimensionale zylindrische Gitter vorgegeben. Die Behandlung des Stofftransports in 2-dimensionalen Polar-Koordinaten erfordert daher, daß das polare Gitter (r', θ) zu jeder Zeit in das zylindrische 1+1-dimensionale Gitter (r, z) eingebettet ist, auf welchem die Scheibenstruktur berechnet wird. Für die innerhalb dieser Arbeit ausgeführten Modellrechnungen ist dies durch die Wahl $\theta_1 = 4.01^\mathrm{o}$ gewährleistet.

Diskretisierung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung Die Diskretisierung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung (4.1.2) in Polar-Koordinaten erfolgt analog zur Diskretisierung der Transport-Reaktions-Gleichung (2.6.17) in Rahmen der Einzonennäherung, d.h. ebenfalls voll implizit. Man erhält (vergl. Glg. (B.3.2) in Anhang B.3)

$$\frac{c_{i,j,k,l}^{n+1} - c_{i,j,k,l}^{n}}{\Delta t} + A_{i,j,k,l}^{n+1} + B_{i,j,k,l}^{n+1} =$$
$$\frac{1}{{r'_k}^2 n_{k,l}^{n+1}} \frac{(r'^2 nD)_{k+\frac{1}{2},l}^{n+1} \frac{c_{i,j,k+1,l}^{n+1} - c_{i,j,k,l}^{n+1}}{r'_{k+1} - r'_k} - (r'^2 nD)_{k-\frac{1}{2},l}^{n+1} \frac{c_{i,j,k,l}^{n+1} - c_{i,j,k-1,l}^{n+1}}{r'_k - r'_{k-1}}}{\frac{1}{2}(r'_{k+1} - r'_{k-1})} + \tag{4.2.1}$$
$$\frac{1}{{r'_k}^2 n_{k,l}^{n+1} \cos\theta_l} \frac{(\cos\theta\, nD)_{k,l+\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{c_{i,j,k,l+1}^{n+1} - c_{i,j,k,l}^{n+1}}{\theta_{l+1} - \theta_l} - (\cos\theta\, nD)_{k,l-\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{c_{i,j,k,l}^{n+1} - c_{i,j,k,l-1}^{n+1}}{\theta_l - \theta_{l-1}}}{\frac{1}{2}(\theta_{l+1} - \theta_{l-1})} + \frac{R_{i,j,k,l}^{n+1}}{n_{k,l}^{n+1}}$$

mit dem radialen Advektionsterm

$$A_{i,j,k,l}^{n+1} = \begin{cases} v'^{n+1}_{r,k,l} \dfrac{c_{i,j,k+1,l}^{n+1} - c_{i,j,k,l}^{n+1}}{r'_{k+1} - r'_k} & : \quad v'^{n+1}_{r,k,l} \leq 0 \\[2ex] v'^{n+1}_{r,k,l} \dfrac{c_{i,j,k,l}^{n+1} - c_{i,j,k-1,l}^{n+1}}{r'_k - r'_{k-1}} & : \quad v'^{n+1}_{r,k,l} > 0 \end{cases}, \tag{4.2.2}$$

dem Advektionsterm in θ-Richtung

$$B_{i,j,k,l}^{n+1} = \begin{cases} v_{\theta,k,l}^{n+1} \dfrac{1}{r'_k} \dfrac{c_{i,j,k,l+1}^{n+1} - c_{i,j,k,l}^{n+1}}{\theta_{l+1} - \theta_l} & : \quad v_{\theta,k,l}^{n+1} > 0 \\ v_{\theta,k,l}^{n+1} \dfrac{1}{r'_k} \dfrac{c_{i,j,k,l}^{n+1} - c_{i,j,k,l-1}^{n+1}}{\theta_l - \theta_{l-1}} & : \quad v_{\theta,k,l}^{n+1} \leq 0 \end{cases} , \tag{4.2.3}$$

dem Ratenterm

$$\frac{R_{i,j,k,l}^{n+1}}{n_{k,l}^{n+1}} = \begin{cases} \frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}}{\tau_{i,j,k,l}^{n+1}} & : \quad i = 1 \\ \frac{c_{i-1,j,k,l}^{n+1}}{\tau_{i-1,j,k,l}^{n+1}} - \frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}}{\tau_{i,j,k,l}^{n+1}} & : \quad 2 \leq i \leq (I_j - 1) \\ \frac{c_{i-1,j,k,l}^{n+1}}{\tau_{i-1,j,k,l}^{n+1}} & : \quad i = I_j \end{cases} , \tag{4.2.4}$$

den Koeffizienten

$$(r'^2 nD)_{k-\frac{1}{2},l}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(r'_k n_{k,l}^{n+1} D_{k,l}^{n+1} + r'_{k-1} n_{k-1,l}^{n+1} D_{k-1,l}^{n+1}\right)$$

$$(r'^2 nD)_{k+\frac{1}{2},l}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(r'_{k+1} n_{k+1,l}^{n+1} D_{k+1,l}^{n+1} + r'_k n_{k,l}^{n+1} D_{k,l}^{n+1}\right)$$

$$(\cos\theta\, nD)_{k,l-\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(\theta_l n_{k,l}^{n+1} D_{k,l}^{n+1} + \theta_{l-1} n_{k,l-1}^{n+1} D_{k,l-1}^{n+1}\right)$$

$$(\cos\theta\, nD)_{k,l+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(\theta_{l+1} n_{k,l+1}^{n+1} D_{k,l+1}^{n+1} + \theta_l n_{k,l}^{n+1} D_{k,l}^{n+1}\right)$$

und den charakteristischen Reaktions-Zeitskalen

$$\tau_{i,\mathrm{for},k,l}^{n+1} = \frac{x_{i+1,\mathrm{cry}}^{1/3} - x_{i,\mathrm{cry}}^{1/3}}{2\, n_{\mathrm{cry}}^{1/3}\, \nu_{\mathrm{vib}}}\, e^{E_{\mathrm{a,for}}/k_{\mathrm{B}} T_{k,l}^{n+1}} \qquad \tau_{i,\mathrm{ens},k,l}^{n+1} = \frac{x_{i+1,\mathrm{cry}}^{1/3} - x_{i,\mathrm{cry}}^{1/3}}{2\, n_{\mathrm{cry}}^{1/3}\, \nu_{\mathrm{vib}}}\, e^{E_{\mathrm{a,ens}}/k_{\mathrm{B}} T_{k,l}^{n+1}} \tag{4.2.5}$$

$$\tau_{i,\mathrm{car},k,l}^{n+1} = \frac{a_{i+1,\mathrm{car}} - a_{i,\mathrm{car}}}{V_{0,\mathrm{car}}\, a_{\mathrm{ox}}\, n_{\mathrm{OH},k,l}^{n+1}} \sqrt{\frac{2\pi m_{\mathrm{OH}}}{k_{\mathrm{B}} T_{k,l}^{n+1}}} \,. \tag{4.2.6}$$

Gleichung (4.2.1) beschreibt folglich die zeitliche Entwicklung der Konzentration eines Tracers j mit der Eigenschaft i bei der radialen Stützstelle r'_k und dem Winkel θ_l.

4.2.2 Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung

Gleichung (4.2.1) bildet ein System von Gleichungen für die Konzentration $c_{i,j,k,l}$, das in den Raumkoordinaten (r'_k, θ_l), $k = 1 \ldots K$, $l = 1 \ldots L$, gekoppelt ist. Für die Bestimmung von $c_{i,j,k,l}$ an einem bestimmten Gitterpunkt (k, l) ist die Kenntnis der physikalischen Größen an den Gitterpunkten (k, l), $(k-1, l)$, $(k+1, l)$, $(k, l-1)$ und $(k, l+1)$ erforderlich.

In Matrix-Darstellung erhält man für das Gleichungssystem (4.2.1) eine Matrix von tridiagonaler Gestalt, die auf beiden Seiten der Diagonalen noch ferne Nebendiagonalen besitzt. Die Einträge auf der Diagonalen und den beiden nahen Nebendiagonalen rühren von den

Gitterpunkten (k,l) bzw. $(k-1,l)$ und $(k+1,l)$ her. Die Einträge der fernen Nebendiagonalen dagegen sind auf die Gitterpunkte $(k,l-1)$ und $(k,l+1)$ zurückzuführen. Die Inversion dieser Matrix ist zwar mittels geeigneter Verfahren möglich, allerdings numerisch relativ aufwändig. Es wird im Rahmen dieser Arbeit ein alternatives Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems (4.2.1) angewendet, das numerisch weniger aufwändig ist.

ADI-Verfahren Zur Lösung des Gleichungssystems (4.2.1) wird das *ADI-Verfahren* (**A**lterning **D**irection **I**mplicit Method) verwendet (Press et al. 1992). Beim ADI-Verfahren handelt es sich um ein implizites Splitting-Verfahren, bei dem die Lösung von partiellen Differentialgleichungen in zwei oder mehr Dimensionen für jede Raumrichtung separat erfolgt. Die Separation der Raumrichtungen ist im Falle der Transport-Reaktions-Gleichungen (4.1.2) möglich, da in diesen keine gemischten Terme mit Ableitungen nach r' und θ auftreten.

Für die Lösung mittels des ADI-Verfahrens wird das System von Gleichungen (4.2.1) also in ein Gleichungssystem für den radialen Transport

$$\frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}-c_{i,j,k,l}^{n}}{\Delta t}+A_{i,j,k,l}^{n+1}= \tag{4.2.7}$$
$$\frac{1}{{r'_k}^2 n_{k,l}^{n+1}}\frac{(r'^2nD)_{k+\frac{1}{2},l}^{n+1}\frac{c_{i,j,k+1,l}^{n+1}-c_{i,j,k,l}^{n+1}}{r'_{k+1}-r'_k}-(r'^2nD)_{k-\frac{1}{2},l}^{n+1}\frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}-c_{i,j,k-1,l}^{n+1}}{r'_k-r'_{k-1}}}{\frac{1}{2}(r'_{k+1}-r'_{k-1})}+\frac{1}{2}\frac{R_{i,j,k,l}^{n+1}}{n_{k,l}^{n+1}}$$

und in ein Gleichungssystem für den Transport in θ-Richtung

$$\frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}-c_{i,j,k,l}^{n}}{\Delta t}+B_{i,j,k,l}^{n+1}= \tag{4.2.8}$$
$$\frac{1}{{r'_k}^2 n_{k,l}^{n+1}\cos\theta_l}\frac{(\cos\theta\, nD)_{k,l+\frac{1}{2}}^{n+1}\frac{c_{i,j,k,l+1}^{n+1}-c_{i,j,k,l}^{n+1}}{\theta_{l+1}-\theta_l}-(\cos\theta\, nD)_{k,l-\frac{1}{2}}^{n+1}\frac{c_{i,j,k,l}^{n+1}-c_{i,j,k,l-1}^{n+1}}{\theta_l-\theta_{l-1}}}{\frac{1}{2}(\theta_{l+1}-\theta_{l-1})}+\frac{1}{2}\frac{R_{i,j,k,l}^{n+1}}{n_{k,l}^{n+1}}$$

aufgespalten. Bei der Separation wurde der Ratenterm ebenfalls separiert, d.h. zu gleichen Teilen auf die beiden Raumrichtungen aufgeteilt.

Die separierten Gleichungssysteme (4.2.7) bzw. (4.2.8) bilden in Matrix-Schreibweise jeweils tridiagonale Matrizen. Folglich lassen sich die Gleichungssysteme (4.2.7) bzw. (4.2.8) mit der Methode lösen, die bereits für die Lösung des Systems von Transport-Reaktions-Gleichung in der Einzonennäherung verwendet wurde (vergl. Anhang B.3). Dies stellt den Vorteil des ADI-Verfahrens gegenüber anderen Verfahren dar, denn die Lösung von zwei tridiagonalen Gleichungssystemen ist verglichen mit der Inversion einer Matrix, wie sie durch Umformung aus dem Gleichungssystem (4.2.1) folgt, mit deutlich weniger Rechenaufwand verbunden.

Im Rahmen des ADI-Verfahrens wird zwischen zwei aufeinander folgenden Zeitschritten die Reihenfolge der Lösung der Gleichungssysteme (4.2.7) bzw. (4.2.8) vertauscht (daher *Alternating* Direction Implicit Method). Wird dies unterlassen, so kann eine der Raumrichtungen im Modell bevorzugt werden, infolge dessen sich mit der Zeit numerische Fehler aufschaukeln können. Das Alternieren der Raumrichtungen beim ADI-Verfahren verhindert die Bevorzugung einer Raumrichtung und sorgt für numerische Stabilität.

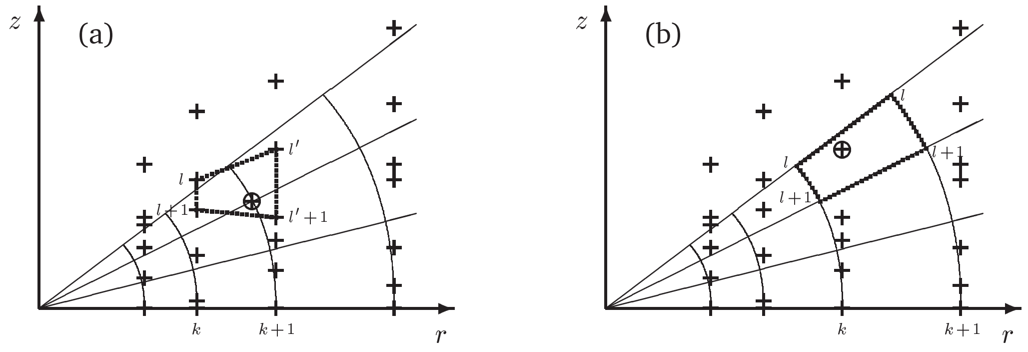


Abbildung 4.2.1: 2-dimensionale Interpolation im Modell. Die 4 Punkte, die zur Interpolation benötigt werden, sind durch gepunktete Linien verbunden. Der Interpolations-Punkt ist eingekreist. **Links:** Interpolation vom 1+1-dimensionalen Gitter in Zylinder-Koordinaten auf das 2-dimensionale Gitter in Polar-Koordinaten. **Rechts:** Interpolation vom 2-dimensionalen Gitter in Polar-Koordinaten auf das 1+1-dimensionale Gitter in Zylinder-Koordinaten. Für eine genauere Erläuterung siehe Text.

Randbedingungen Die Randbedingungen, die für die Lösung der separierten Transport-Reaktions-Gleichung (4.2.7) bzw. (4.2.8) vorzugeben sind, werden wie folgt gewählt:

Es werden am oberen Rand und an den beiden seitlichen Rändern homogene von Neumann-Randbedingungen vorgeben, d.h. es wird am oberen Rand $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial \theta} = 0$ und an den beiden seitlichen Rändern $\frac{\partial c_{i,j}}{\partial r'} = 0$ gesetzt. Diese Wahl sorgt dafür, daß kein Ein- oder Ausfluß an den Rändern stattfinden kann. In der Mittelebene der Scheibe sind die Randbedingungen durch die Symmetrie festgelegt.

Die Anfangsbedingungen werden wie im Falle der 1-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung gewählt (vergl. Abschnitt 2.7.3). Es soll anfangs also kein kristallines Silikat vorliegen, und die Anfangsverteilung für den Kohlenstoffstaub in der Scheiben-Mittelebene wird aus einem stationären Scheibenmodell in der Einzonennäherung gewonnen, welches die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs berücksichtigt. In θ-Richtung wird die Verteilung des Kohlenstoffstaubs zu Beginn der Rechnung konstant gesetzt.

4.2.3 Interpolation zwischen den Gittern

Es wird nun das Verfahren der Interpolation zwischen dem 1+1-dimensionalen Gitter in Zylinder-Koordinaten, auf dem die Scheibenstruktur vorgegeben wird, und dem 2-dimensionalen Gitter in Polar-Koordinaten, auf welchem der Tracer-Transport berechnet wird, beschrieben.

Interpolation vom 1+1D-Gitter auf das 2D-Gitter Das Problem der Interpolation vom 1+1-dimensionalen Gitter auf das 2-dimensionale Gitter ist in Abb. 4.2.1(a) dargestellt.

Das vertikale Gitter wird aus der Lösung der vertikalen Scheibengleichungen mittels eines Runga-Kutta-Verfahrens mit automatischer Schrittweiten-Steuerung gewonnen (vergl. Abschnitt 3.4.2). Aus diesem Grund ist die Anordnung der vertikalen Gitterpunkte bei unterschiedlichen Radien i. A. verschieden, d.h. das vertikale Gitter ist unregelmäßig.

Für die Interpolation vom 1+1-dimensionalen Gitter auf das 2-dimensionale Gitter werden 4 Punkte des (r, z)-Gitters verwendet, die den Gitterpunkt des (r', θ)-Gitters, auf den interpoliert werden soll, einrahmen (siehe Abb. 4.2.1(a)). Die 4 Punkte des (r,z)-Gitters werden im Modellprogramm mittels eines Suchalgorithmus' gefunden. Aufgrund des unregelmäßigen (r,z)-Gitters bilden die 4 Punkte i. A. ein Trapez.

Das einfachste 2-dimensionale Interpolations-Verfahren stellt die *bilineare Interpolation* dar, die für den Fall einer orthogonalen Anordnung der für die Interpolation verwendeten Gitterpunkte gültig ist (Press et al. 1992). Dieses Verfahren wird hier für den trapezförmigen Fall erweitert. Danach berechnet sich eine Größe y am Raumpunkt (r,z) mit Hilfe des Ausdrucks

$$y(r,z) = (1-t)(1-u)\, y_{k,l+1} + t(1-u)\, y_{k+1,l'+1} + (1-t)u\, y_{k,l} + tu\, y_{k+1,l'} \tag{4.2.9}$$

mit den Koeffizienten

$$t = \frac{r - r_k}{r_{k+1} - r_k} \qquad u = (1-t)u_1 + tu_2$$

$$u_1 = \frac{z - z_{l+1}}{z_l - z_{l+1}} \qquad u_2 = \frac{z - z_{l'+1}}{z_{l'} - z_{l'+1}}\ ,$$

wobei gemäß Abb. 4.2.1 die Werte von y an den Gitterpunkten (k,l), $(k,l+1)$, $(k+1,l')$ und $(k+1,l'+1)$ benötigt werden.

Im Modell werden die Teilchendichte n, der Diffusionskoeffizient D, die Temperatur T, die OH-Teilchendichte n_{OH}, die radiale Driftgeschwindigkeit v_r und die vertikale Driftgeschwindigkeit v_z vom $1{+}1$-dimensionalen zylindrischen Gitter auf das 2-dimensionale Gitter in Polar-Koordinaten mittels Glg. (4.2.9) interpoliert.

Die Geschwindigkeiten v_r und v_z bilden einen 2-komponentigen Vektor $\underline{v} = (v_r, v_z)$, der das Geschwindigkeitsfeld der Materie in der Scheibe beschreibt. Um die Werte der Geschwindigkeiten $v_{r'}$ und v_θ in Polar-Koordinaten zu bestimmen, ist eine Vektor-Transformation von $\underline{v}$ auszuführen. Diese ist gegeben durch

$$\left(v'_r, v_\theta\right) = \left(v_r \cos\theta + v_z \sin\theta\, ,\ v_r \sin\theta - v_z \cos\theta\right)\ . \tag{4.2.10}$$

Die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes (v_r, v_z) im Modell wird in Abschnitt 4.3 beschrieben. Die Transformations-Vorschrift für die Koordinaten ist gegeben durch

$$(r,z) = \left(r' \cos\theta\, ,\ r' \sin\theta\right)\ . \tag{4.2.11}$$

Auf diese Weise sind alle benötigten Größen für die Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung (4.1.2) vorgegeben.

Interpolation vom 2D-Gitter auf das 1+1D-Gitter Nach Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung (4.1.2) erhält man die Konzentration $c_{i,j}$ eines Tracers j mit der Eigenschaft i an allen Raumpunkten (k,l) des Gitters in Polar-Koordinaten. Aus den $c_{i,j}$ werden nach Glgen. (2.6.18) bzw. (2.6.19) die Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit, f_{for} bzw. f_{ens}, sowie der Kondensationsgrad von Kohlenstoff in Ruß, f_{car}, berechnet. Diese Größen verändern die Opazität in der Scheibe, wie bereits bezüglich des Scheibenmodells mit rein radialem Tracer-Transport erläutert wurde (siehe Abschnitt 2.5). Daher müssen f_{for}, f_{ens} und f_{car} vom Polarkoordinaten-Gitter zurück auf das $1{+}1$-dimensionale Zylinderkoordinaten-Gitter interpoliert werden. Diese Art von Interpolation ist Abb. 4.2.1(b) verdeutlicht.

Da das Polarkoordinaten-Gitter ein orthogonales Gitter ist, kann die Interpolation auf das (r, z)-Gitter durch bilineare Interpolation geschehen. Eine Größe y am Raumpunkt (r', θ) berechnet sich demnach mittels

$$y(r', \theta) = (1-t)(1-u)\, y_{k,l+1} + t(1-u)\, y_{k+1,l+1} + (1-t)u\, y_{k,l} + tu\, y_{k+1,l} \ , \qquad (4.2.12)$$

wobei die Koeffizienten durch

$$t = \frac{r' - r_k}{r_{k+1} - r_k} \qquad\qquad u = \frac{\theta - \theta_{l+1}}{\theta_l - \theta_{l+1}}$$

gegeben sind. Für diese Art der Interpolation werden folglich die Werte von y an den Gitterpunkten (k, l), $(k, l+1)$, $(k+1, l)$ und $(k+1, l+1)$ benötigt. Diese Punkte werden im Modellprogramm ebenfalls mit Hilfe eines Suchalgorithmus' gefunden.

Mit Hilfe der Vorschrift (4.2.12) werden also $f_{\rm for}$, $f_{\rm ens}$ und $f_{\rm car}$ im Modell von Polar-Koordinaten nach Zylinder-Koordinaten interpoliert.

4.2.4 Globales Lösungsverfahren für das 2-dimensionale Modell

Abb. 4.2.2 zeigt das Flußdiagramm des Modellprogramms für die Berechnung von Scheibenmodellen, in denen der 2-dimensionale Tracer-Transport berücksichtigt ist. Das globale Lösungsverfahren für das 2-dimensionale Modell sieht wie folgt aus:

(1) Zunächst wird die radiale Scheibenstruktur in der Einzonennäherung unter Berücksichtigung des radialen Stofftransports berechnet. Dies geschieht auf die Weise, die in Kapitel 2 beschrieben ist.

(2) Daraufhin wird die vertikale Scheibenstruktur berechnet. Die Methode der Berechnung der vertikalen Scheibenstruktur ist in Kapitel 3 dargestellt.

(3) Durch (1) und (2) ist die $1{+}1$-dimensionale Struktur der Scheibe vorgegeben. Es wird vom $1{+}1$-dimensionalen Gitter in Zylinder-Koordinaten auf das 2-dimensionale Gitter in Polar-Koordinaten interpoliert und das System von Transport-Reaktions-Gleichungen (4.1.2) gelöst.

(4) Aus der Lösung des Systems von Transport-Reaktions-Gleichungen (4.1.2) werden neue Werte für $f_{\rm for}$, $f_{\rm ens}$ und $f_{\rm car}$ berechnet. Diese werden von 2-dimensionalen Polar-Koordinaten auf 2-dimensionale Zylinder-Koordinaten zurück interpoliert und gehen in die neuerliche Berechnung des $1{+}1$-dimensionalen Modells ein.

Globale Iteration Infolge der Rückwirkung des Stofftransports auf den Scheibenaufbau ist die Lösung für die Scheibenstruktur mittels einer globalen Iteration zu finden. Im Modell wird eine globale Fixpunkt-Iteration der Temperatur ausgeführt, mit der die Temperatur auf dem 2-dimensionalen Polarkoordinaten-Gitter bis zu einer Genauigkeit von $\Delta_{\rm gl} = 5 \cdot 10^{-3}$ iteriert wird.

Allerdings erfordert die Berechnung der $1{+}1$-dimensionale Struktur der Scheibe bereits derart viel Rechenkapazität, daß nicht in allen Modellrechnungen die globale Iteration ausgeführt wurde. Aus diesem Grund ist in Abb. 4.2.2 die globale Iterationsschleife lediglich gestrichelt gezeichnet. Falls auf die globale Iteration verzichtet wird, ist das Verfahren der Berechnung der 2-dimensionalen Scheibenstruktur nicht mehr implizit, sondern ein

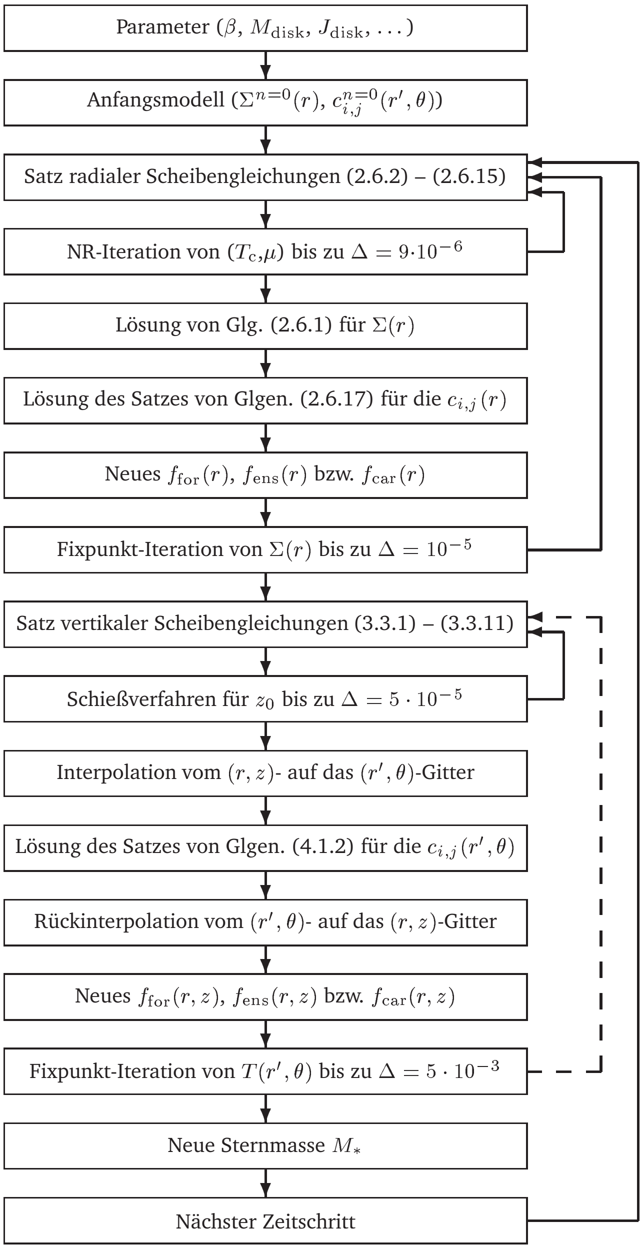


Abbildung 4.2.2: Flußdiagramm des Computerprogramms für das Scheibenmodell mit 2-dimensionalem Tracer-Transport. Die Pfeile auf der rechten Seite des Diagramms kennzeichnen die Iterationsschleifen bzw. die Zeitschleife. Δ bezeichnet die Genauigkeit der Iteration. Die gestrichelte Linie deutet an, daß die globale Iteration der Temperatur im 2-dimensionalen Scheibenmodell nicht in jeder Modellrechnung ausgeführt wird. Für Details siehe Text.

gemischt implizites-explizites Verfahren. Modellrechnungen mit und ohne globale Iteration werden in den Ergebnissen verglichen (Abschnitt 4.4).

Die Wahl des Wertes für die Genauigkeit $\Delta_{\rm gl}$ ist beschränkt durch die numerischen Fehler, die durch die Interpolationen zwischen den Gittern hervorgerufen werden. Für kleinere Werte als $\Delta_{\rm gl} \sim 5 \cdot 10^{-3}$ ist aus diesem Grund nicht für alle Zeitschritte die Konvergenz der globalen Iteration gewährleistet. Dies erklärt die Wahl $\Delta_{\rm gl} = 5 \cdot 10^{-3}$.

Der Berechnung eines typischen Scheibenmodells ohne globale Iteration bis zu einer Entwicklungszeit von 10^6 Jahren benötigt etwa 4 Wochen auf einem P4 XEON $2.8\,$GHz-Computer. Dasselbe Modell mit Ausführung der globalen Iteration erfordert etwa die 2.5-fache Rechendauer.

4.3 Das 2-dimensionale Geschwindigkeitsfeld in der Scheibe

Es verbleibt noch das 2-dimensionale Geschwindigkeitsfeld in der Scheibe vorzugeben. Dieses wird für die Lösung der 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichung (4.1.2) benötigt. Die Wahl des globalen Geschwindigkeitsfeldes stellt einen entscheidenden Faktor bei der Berechnung des Tracer-Transports in protoplanetaren Scheiben dar, denn der advektive Transport ist im Gegensatz zur Diffusion ein gerichteter Prozeß, mit Hilfe dessen Tracer sehr effizient vom Ort ihrer Bildung forttransportiert werden können. Daher ist die Vorgabe eines für protoplanetare Scheiben möglichst realistischen 2-dimensionalen Geschwindigkeitsfeldes wünschenswert.

4.3.1 Vertikal konstantes Geschwindigkeitsfeld

Eine einfache Wahl für das 2-dimensionale Geschwindigkeitsfeld besteht darin, die radiale Geschwindigkeit v_r aus dem Einzonenmodell zu entnehmen und vertikal konstant zu setzen sowie die vertikale Geschwindigkeit v_z gleich Null zu setzen. Dies stellt möglicherweise keine besonders realistische Wahl für das globale Geschwindigkeitsfeld der Scheibenmaterie dar, wie weiter unten ausgeführt wird. Modellrechnungen mit dieser Wahl für das Geschwindigkeitsfeld sollen jedoch als Referenz für folgende Modellrechnungen dienen. Zudem wird genau ein solches Geschwindigkeitsfeld für Scheibenmodelle in der Einzonennäherung angenommen (vergl. Kapitel 2).

Da im Modell der Stofftransport in Polar-Koordinaten behandelt wird, wird in den Modellrechnungen nicht $v_z = 0$ und v_r in z-Richtung konstant gesetzt, sondern

$$v_r'(r',\theta) = \text{konst.} \quad \text{in } \theta\text{-Richtung}\,, \qquad v_\theta(r',\theta) = 0 \tag{4.3.1}$$

gesetzt. Dies ist damit zu erklären, daß im Falle von $v_z = 0$ am oberen Rand $v_\theta \neq 0$ folgt. Dies wiederum kann dort infolge der homogenen von Neumann-Randbedingung einen unphysikalischen Materiestau hervorrufen. Aufgrund des kleinen Öffnungswinkels der Scheibe ($\theta_1 = 4.01^o$) hat die Wahl $v_\theta = 0$ statt $v_z = 0$ lediglich geringe Auswirkungen auf die Resultate der Modellrechnungen.

Im Rahmen dieser Arbeit werden u.a. die Ergebnisse von Modellrechnungen vorgestellt, bei denen ein Strömungsfeld der Form (4.3.1) vorgegeben wurde. Abb. 4.3.1 zeigt das 2-dimensionale Geschwindigkeitsfeld der Scheibe zwischen 2 und $10\,\mathrm{AU}$ zum Zeitpunkt $t = 0$ für diese Art von Modellen. Sowohl die Radialgeschwindigkeit als auch die Vertikalgeschwindigkeit sind im Bereich zwischen 2 und $10\,\mathrm{AU}$ negativ, d.h. sie weisen in Richtung des Zentralsterns.

Abb. 4.3.1 zeigt nochmals die unregelmäßige Struktur des vertikalen Gitters (vergl. Abb. 3.5.1). Die Verdichtung der Gitterpunkte um $r = 7\,\mathrm{AU}$ herum ist auf die Kondensation/Sublimation von Eis zurückzuführen.

4.3.2 Meridionales Geschwindigkeitsfeld

Das reale Geschwindigkeitsfeld in Scheiben dürfte jedoch komplexer sein, als das in der Form (4.3.1) angenommene.

Urpin (1984) behandelte Modelle von Scheiben um kompakte Objekte (Weiße Zwerge, Neutronensterne, Schwarze Löcher) und berücksichtigte in den Aufbaugleichungen der

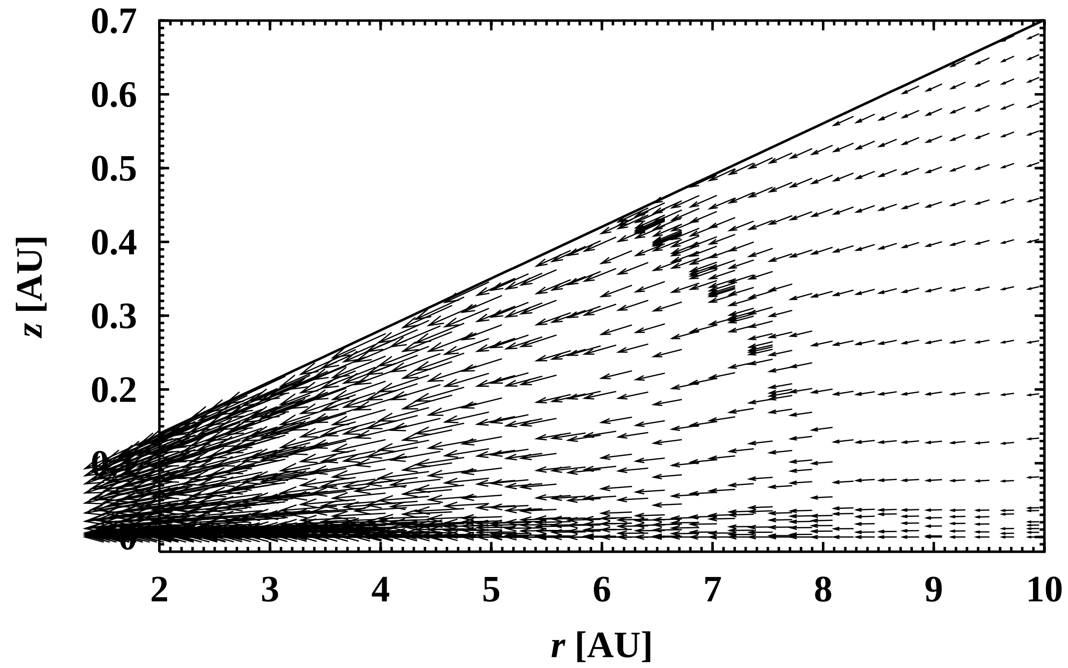


Abbildung 4.3.1: 2-dimensionales Geschwindigkeitsfeld der Scheibe zwischen 2 und 10 AU zum Zeitpunkt $t = 0$ in den Modellen, bei denen die Radialgeschwindigkeit aus dem Einzonenmodell sowie $v_\theta = 0$ vorgegeben ist. Die Länge der Vektoren ist proportional zum Betrag der Geschwindigkeit. Die durchgezogene Linie zeigt den oberen Rand des Polarkoordinaten-Gitters ($\theta_1 = 4.01^\circ$).

Scheibe Terme höherer Ordnung. Es zeigte sich in diesen Modellen, daß die Radialgeschwindigkeit v_r in der Scheiben-Mittelebene nach außen gerichtet ist, in einer bestimmten Höhe über der Scheiben-Mittelebene das Vorzeichen wechselt und oberhalb dieser Höhe nach innen gerichtet ist. In der Einzonennäherung folgt im Gegensatz dazu eine Radialgeschwindigkeit, die in weiten Bereichen der Scheibe ein negatives Vorzeichen hat, d.h. nach innen gerichtet ist (vergl Abb. 4.3.1). Lediglich in den äußeren Regionen der Scheibe (nicht abgebildet) hat v_r in der Einzonennäherung aus Gründen der Drehimpulserhaltung ein positives Vorzeichen.

Das Ergebnis von Urpin (1984) wurde von Kley & Lin (1992) sowie von Różyczka et al. (1994) anhand von 2-dimensionalen numerischen Simulationen bestätigt. Regev & Gitelman (2002) schließlich stellten fest, daß das meridionale Geschwindigkeitsfeld in Scheiben nicht ein thermisches Phänomen, sondern ein dynamisches Phänomen darstellt, bei dem es sich offensichtlich um eine universelle Erscheinung in Akkretionsscheiben handelt.

Analytischer Ausdruck für das meridionale Geschwindigkeitsfeld Takeuchi & Lin (2002) leiteten einen analytischen Ausdruck für die Radialgeschwindigkeit v_r und die Azimutalgeschwindigkeit v_ϕ für Scheiben mit α-Viskosität ab. Dabei wurden bei der Berechnung von v_r maximal Terme der Ordnung $\varepsilon \sim \frac{h_s}{r} \sim \frac{c_s}{v_K}$ und bei der Berechnung von v_ϕ maximal Terme der Ordnung ε^2 berücksichtigt. Keller (2003) bzw. Keller & Gail (2004) bestätigten das Ergebnis von Takeuchi & Lin (2002) und berechneten gleichzeitig die Vertikalgeschwindigkeit v_z in 1. Ordnung von ε.

Es soll im Folgenden das meridionale Geschwindigkeitsfeld der Scheibe für den Fall der β-Viskosität abgeleitet werden. Nach Takeuchi & Lin (2002) sowie Keller (2003) gilt im stationären Grenzfall für das Geschwindigkeitsfeld in der Scheibe

$$v_\phi = \left[1 - \frac{3}{4}\left(\frac{z}{r}\right)^2 + \frac{r^2}{2GM_*\rho}\frac{\partial P}{\partial r}\right] v_\mathrm{K} \tag{4.3.2}$$

$$v_r = \left[\frac{1}{r\rho}\frac{\partial}{\partial r} r^3 \rho\,\nu \frac{\partial}{\partial r}\frac{v_\phi}{r} + \frac{r}{\rho}\frac{\partial}{\partial z}\rho\,\nu\frac{\partial}{\partial z}v_\phi\right]\frac{2}{v_\mathrm{K}} \tag{4.3.3}$$

$$v_z = -\frac{1}{r\rho}\int_0^z \frac{\partial}{\partial r} r\rho\, v_r\ , \tag{4.3.4}$$

wobei, wie oben erwähnt, der Ausdruck für v_ϕ in 2. Ordnung von ε genau ist und die Ausdrücke für v_r bzw. v_z in 1. Ordnung von ε genau sind.

Zum Zwecke der Vereinfachung von Glgen. (4.3.2) – (4.3.4) werden nun verschiedene Annahmen gemacht. Zum einen wird die Zustandsgleichung (2.2.14) des idealen Gases vorausgesetzt, wobei die Schallgeschwindigkeit durch Glg. (2.2.15) gegeben ist. Des weiteren wird für die Dichtestruktur der Scheibe die stationäre Lösung der Einzonennäherung herangezogen, d.h. (z.B. Pringle 1981; vergl. Glg. 2.2.16)

$$\rho(r,z) = \rho_\mathrm{c}(r)\, e^{-z^2/(2H^2)} \tag{4.3.5}$$

mit der Zentraldichte (vergl. Glg. (2.2.9))

$$\rho_\mathrm{c}(r) = \frac{|\dot{M}|}{6\pi\nu H}\left(1 - \sqrt{\frac{R_*}{r}}\right) \tag{4.3.6}$$

und der Skalenhöhe

$$H = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{c_\mathrm{s}}{\Omega_\mathrm{K}}\ . \tag{4.3.7}$$

Schließlich wird angenommen, daß der radiale Temperaturverlauf in der Scheiben-Mittelebene durch ein Potenzgesetz der Form

$$T_\mathrm{c}(r) \propto r^{-\lambda} \tag{4.3.8}$$

gegeben ist, wobei die Potenz λ entweder als freier Parameter vorzugeben oder aus dem Scheibenmodell zu bestimmen ist.

Unter den genannten Voraussetzungen erhält man für das Geschwindigkeitsfeld in der Scheibe für den Fall, daß die Viskosität durch den β-Ansatz (Glg. (2.2.11)) gegeben ist,

$$v_\phi = \left[1 - \frac{1}{4}\left(4 + \lambda - f(r)\right)\frac{c_\mathrm{s}^2}{v_\mathrm{K}^2} - \frac{1}{4}\lambda\frac{z^2}{r^2}\right] v_\mathrm{K} \tag{4.3.9}$$

$$v_r(r,z) = \beta\left[3 - \frac{5}{2}\lambda - \frac{3}{2}f(r) - \frac{1}{2}(9-5\lambda)\left(\frac{z}{H}\right)^2\right] v_\mathrm{K} \tag{4.3.10}$$

$$v_z(r,z) = \beta\left[C_1\left(\frac{z}{r}\right) - C_2\left(\frac{z}{H}\right)^3\right] v_\mathrm{K} \tag{4.3.11}$$

mit dem Faktor

$$f(r) = \left(\sqrt{\frac{r}{R_*}} - 1\right)^{-1}$$

und den Koeffizienten

$$C_1 = \frac{1}{4}\left[(3-\lambda)(6-5\lambda) - (18-8\lambda)f(r)\right] \qquad C_2 = \frac{1}{4}(3-\lambda)(9-5\lambda) \ .$$

Der entsprechende analytische Ausdruck des meridionalen Geschwindigkeitsfeldes für den Fall, daß die Viskosität durch den α-Ansatz gegeben ist, ist in Keller (2003) bzw. Keller & Gail (2004) angegeben.

Gleichungen (4.3.10) und (4.3.11) liefern das 2-dimensionale meridionale Geschwindigkeitsfeld (v_r, v_z) in der Scheibe. Der Ausdruck für die Azimutalgeschwindigkeit (4.3.9) des meridionalen Strömungsfeldes wird im 2-dimensionalen, axialsymmetrischen Modell nicht benötigt. Es sei jedoch angemerkt, daß der Term in Klammern von Glg. (4.3.9) die Abweichung vom Keplerschen Rotationsgesetz beschreibt, die beim meridionalen Strömungsfeld auftritt.

Berechnung von λ im Modell Aus Glg. (4.3.10) läßt sich die Höhe z_λ bestimmen, bei der die Radialgeschwindigkeit des meridionalen Strömungsfeldes ihr Vorzeichen wechselt. Man erhält

$$\frac{z_\lambda}{H} = \sqrt{\frac{6-5\lambda-3f(r)}{9-5\lambda}} \ . \tag{4.3.12}$$

z_λ hängt hauptsächlich von λ ab, da $f(r \to \infty) = 0$ gilt, und nur in der Nähe des Innenrandes auch vom Faktor $f(r)$. Die Struktur des 2-dimensionalen Strömungsfeldes in der Scheibe hängt folglich maßgeblich vom radialen Temperaturverlauf ab.

Die Potenz λ des radialen Temperaturprofils (4.3.8) wird lokal an jeder radialen Stützstelle r_k in der Scheiben-Mittelebene bestimmt. Dies geschieht mit Hilfe einer quadratischen Interpolation der Zentral-Temperatur T_c zwischen den Stützenstellen r_{k-1}, r_k und r_{k+1}. Als radiales Temperaturprofil wird jenes herangezogen, welches aus dem Einzonenmodell folgt.

Das meridionale Geschwindigkeitsfeld im Modell Im Rahmen dieser Arbeit wurden Modellrechnungen durchgeführt, bei denen das 2-dimensionale meridionale Geschwindigkeitsfeld (Glgen. (4.3.10) und (4.3.11)) für die Berechnung des Stofftransports verwendet und dabei zu jedem Zeitpunkt neu bestimmt wurde. Abb. 4.3.2 zeigt das 2-dimensionale meridionale Geschwindigkeitsfeld der Scheibe zwischen 2 und $10\,\mathrm{AU}$ zum Zeitpunkt $t = 0$ für diese Art Modelle.

Es läßt sich erkennen, daß die Radialgeschwindigkeit im überwiegenden Teil des Bereichs zwischen 2 und $10\,\mathrm{AU}$ nahe der Mittelebene nach außen und in größere Höhe nach innen gerichtet ist. Allerdings existieren auch Bereiche, in denen die Radialgeschwindigkeit in vertikaler Richtung überall negativ ist. Aus Glg. (4.3.10) folgt, daß dies für Bereiche der Fall ist, in denen für den Temperaturexponenten $\lambda > \frac{6}{5}$ gilt. Ein solch steiler Temperaturgradient kann z.B. um die schmalen Zonen der Staub- und Eisverdampfung herum vorliegen. In weiten Teilen des chemisch aktiven Bereichs der Scheibe gilt jedoch $\lambda < \frac{6}{5}$, d.h. der advektive Stofftransport nahe der Scheiben-Mittelebene ist auswärts gerichtet.

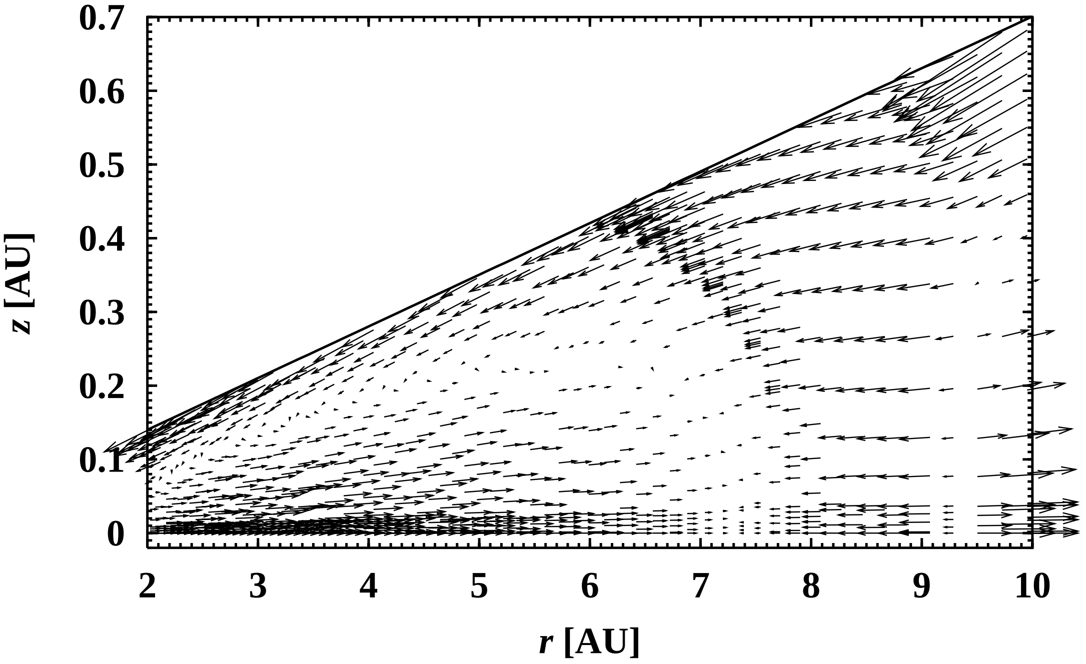


Abbildung 4.3.2: 2-dimensionales meridionales Geschwindigkeitsfeld der Scheibe zwischen 2 und 10 AU zum Zeitpunkt $t = 0$ in den Modellen, in denen ein solches Geschwindigkeitsfeld zu jedem Zeitpunkt neu berechnet wurde. Die Länge der Vektoren ist proportional zum Betrag der Geschwindigkeit. Die durchgezogene Linie zeigt den oberen Rand des Polarkoordinaten-Gitters ($\theta_1 = 4.01°$). Der Streckungsfaktor für die Vektoren ist identisch zu dem mit Abb. 4.3.1.

4.4 Ergebnisse der 2-dimensionalen Modellrechnungen

Es werden im Folgenden die Ergebnisse der Modellrechnungen mit 2-dimensionalem Stofftransport vorgestellt und diskutiert. Die unterschiedlichen Modellrechnungen, die in diesem Zusammenhang durchgeführt worden sind, sind in Tab. 4.4.1 aufgelistet.

4.4.1 Modellrechnungen mit unterschiedlicher Scheibengeometrie

Um die Ergebnisse des 2-dimensionalen Tracer-Transports besser verständlich zu machen, soll zunächst veranschaulicht werden, welchen Einfluß die Scheibengeometrie auf die Ergebnisse von Modellen in der Einzonennäherung hat. Zu diesem Zweck sind folgende Modellrechnungen durchgeführt worden:

(1) Das Modell 1DR mit 1-dimensionalem radialen Tracer-Transport in Zylinder-Koordinaten (r, z), d.h. die Transport-Reaktions-Gleichung ist durch Glg. (2.6.17) gegeben (entspricht dem Standardmodell 1DBS).

(2) Das Modell 1DRR mit 1-dimensionalem radialen Tracer-Transport in Polar-Koordinaten (r', θ), d.h. die Transport-Reaktions-Gleichung ist durch Glg. (4.1.3) gegeben.

(3) Das Modell 1DRH mit 1-dimensionalem radialen Tracer-Transport in konkaven Koordinaten (s, q), d.h. die Transport-Reaktions-Gleichung ist durch Glg. (4.1.4) gegeben.

Tabelle 4.4.1: Modellrechnungen mit 2-dimensionalem Tracer-Transport.

Modell	Beschreibung
1DR	Modell für den 1-dimensionalen radialen Tracer-Transport in Zylinder-Koordinaten (r, z) (entspricht dem Standardmodell 1DBS)
1DRR	Modell 1DR in Polar-Koordinaten Koordinaten (r', θ)
1DRH	Modell 1DR in konkaven Koordinaten (s, q)
2DRR	Modell für 2-dimensionalen Tracer-Transport mit vereinfachter vertikaler Scheibenstruktur
2DS0	Modell für den 2-dimensionalen Tracer-Transport mit vertikal konstantem Geschwindigkeitsfeld ohne globale Iteration
2DST	Modell 2DS0 mit globaler Iteration
2DV0	Modell für den 2-dimensionalen Tracer-Transport mit meridionalem Geschwindigkeitsfeld ohne globale Iteration
2DVT	Modell 2DV0 mit globaler Iteration

Bezüglich der unterschiedlichen Koordinatendarstellungen wird auf Abschnitt 4.1 und Abb. 4.1.1 verwiesen. Man beachte, daß es sich bei den genannten Modellen um reine Einzonenmodelle handelt. Der 2-dimensionale Stofftransport wird in den nachfolgenden Abschnitten diskutiert.

Das Ergebnis der Modellrechnungen (1) – (3) zeigt Abb. 4.4.1. Dort ist der radiale Verlauf (a) des Kristallisationsgrads von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$ und (b) des Kondensationsgrads von C in Ruß f_{car} in den Modellen 1DR (durchgezogene Linien), 1DRR (gestrichelte Linien) und 1DRH (Strichpunkt-Linien) für die Zeitpunkte $t = 0$, 10^5 und 10^6 a abgebildet.

Radialer Verlauf von $\boldsymbol{f_{\mathrm{cry,for}}}$ Die Unterschiede zwischen den Modellen sind besonders deutlich anhand des radialen Verlaufs von $f_{\mathrm{cry,for}}$ zu erkennen (Abb. 4.4.1(a)). Zum einen weisen die Modelle 1DRR und 1DRH gegenüber dem Modell 1DR einen wesentlich ineffizienteren Stofftransport auf, d.h. in den Modellen 1DRR und 1DRH werden Tracer in gleicher Zeit nicht so weit radial nach außen gemischt wie im Modell 1DR. Dies hat seine Ursache darin, daß sich die Scheibe in den Modellen 1DRR und 1DRH nach außen hin aufweitet. Im Vergleich zum Modell 1DR in Zylinder-Koordinaten finden transportierte Stoffe dort in vertikaler Richtung mehr Raum vor, in dem sie sich diffusiv verteilen können. Aus diesem Grund ist $f_{\mathrm{cry,for}}$ in den Modellen 1DRR und 1DRH in den äußeren Scheibenregionen nach 10^6 a um beinahe eine Zehnerpotenz geringer als im Modell 1DR.

Zum anderen ist der Stofftransport im Modell 1DRH effizienter als im Modell 1DRR. Dies erscheint nach obiger Diskussion zunächst nicht plausibel, da sich in konkaven Koordinaten (Modell 1DRH) der Öffnungswinkel der Scheibe nach außen hin vergrößert, während dieser in Polar-Koordinaten (Modell 1DRR) konstant ist. Daher sollte eigentlich der Stofftransport in Polar-Koordinaten effizienter als in konkaven Koordinaten sein. Jedoch führt die Selbstgravitation der Scheibe dazu, daß die Dichteskalenhöhe h_{s} im äußeren Scheibenbereich ein lokales Minimum durchläuft (vergl. Abb. 2.8.3(c)). Die Dichteskalenhöhe bestimmt aber den Verlauf des oberen Randes in konkaven Koordinaten. Folglich verengt sich die Scheibe in konkaven Koordinaten in ihrem selbstgravitierenden Bereich, so daß dort Tracer im Modell 1DRH effizienter nach außen gemischt werden können als im Modell 1DRR.

In den nicht-selbstgravitierenden Bereichen nimmt der Öffnungswinkel der Scheibe im Modell 1DRH nach außen hin zu. Dies beeinflußt den Tracer-Transport im Modell 1DRH

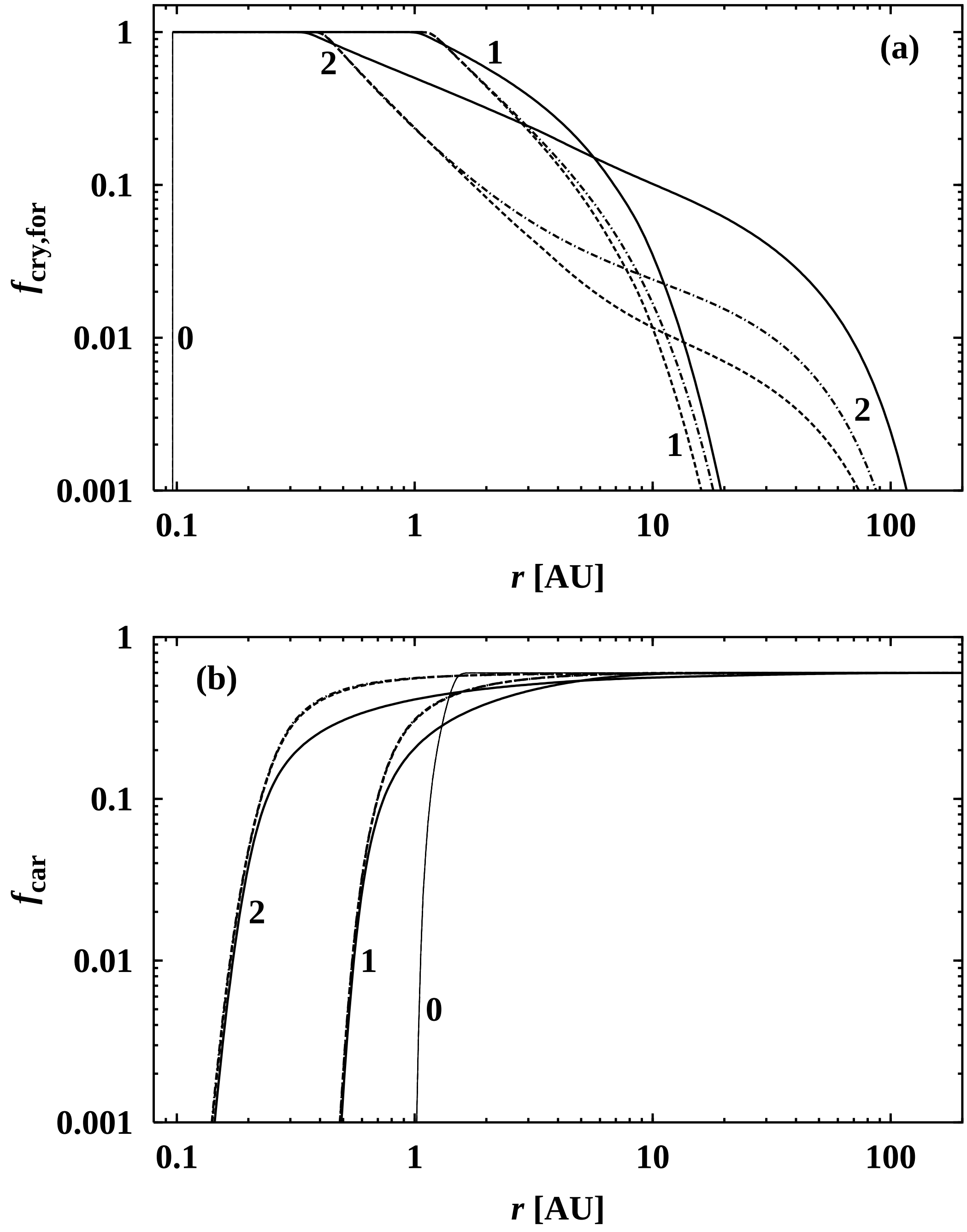


Abbildung 4.4.1: Modelle für den 1-dimensionalen radialen Tracer-Transport, denen unterschiedliche Scheibengeometrien zugrunde liegen. Durchgezogene Linien: Modell 1DR in Zylinder-Koordinaten (r, z). Gestrichelte Linien: Modell 1DRR in Polar-Koordinaten (r', θ). Strichpunkt-Linien: Modell 1DRH in konkaven Koordinaten (s, q). **(a)** Kristallisationsgrad von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$. **(b)** Kondensationsgrad von C in Ruß f_{car}. Es sind die Ergebnisse jeweils nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2) aufgetragen. Beachte, daß die Kurven für f_{car} in den Modellen 1DRR und 1DRH übereinander liegen. Weitere Details siehe Text.

im Vergleich zum Modell 1DRR jedoch kaum, weil h_{s} in den nicht-selbstgravitierenden Bereichen eine annähernd lineare Funktion des Radius' ist.

Der radiale Verlauf des Kristallisationsgrads von Enstatit, $f_{\rm cry,ens}$, ist der Übersichtlichkeit halber nicht in Abb. 4.4.1(a) gezeigt. Dieser weist aber im Prinzip die gleichen Merkmale auf wie der radiale Verlauf von $f_{\rm cry,for}$ (vergl. Abb. 2.8.6(a)).

Radialer Verlauf von $f_{\rm car}$ Der radiale Verlauf von $f_{\rm car}$ zeigt, wie die Scheibengeometrie den Tracer-Transport in den inneren Scheibenregionen beeinflußt (Abb. 4.4.1(b)). Da sich die Scheibe sowohl in Polar-Koordinaten als auch in konkaven Koordinaten nach innen hin verengt, weisen Tracer in den Modellen 1DRR und 1DRH dort eine größere Konzentration auf als im Modell 1DR. Die maximale Abweichung zwischen den Modellen beträgt etwa $60\,\%$. Im inneren Scheibenbereich ist darüber hinaus die Selbstgravitation zu vernachlässigen, so daß $h_{\rm s}$ näherungweise proportional zu r ist. Die Folge ist, daß der radiale Verlauf von $f_{\rm car}$ in den Modellen 1DRR und 1DRH praktisch identisch ist.

Scheibenstrukturen der Modelle im Vergleich Die Akkretionsscheibe im Modell 1DR ist etwas kühler als in den Modellen 1DRR und 1DRH. Dies liegt daran, daß im Modell 1DR in der inneren Scheibe weniger Kohlenstoffstaub und in der äußeren Scheibe mehr kristallines Silikat vorkommt. Dies vermindert die Opazität, so daß die Scheibe des Modells 1DR effizienter gekühlt wird als im Modell 1DRR bzw. 1DRH. Die maximale Temperaturdifferenz zwischen den Modellen beläuft sich auf $\sim 120\,{\rm K}$ (bei $T_{\rm c} \approx 1\,000\,{\rm K}$). Aufgrund dieser Temperaturdifferenz ist die Scheibe des Modells 1DR gegenüber den Scheiben der Modelle 1DRR und 1DRH etwas dichter. Der Dichteunterschied zwischen den Modellen beträgt im Äußersten $\sim 10\,\%$.

Fazit des Abschnitts Zusammengefaßt zeigt dieser Abschnitt, daß die Wahl der Koordinatendarstellung, welche die Scheibengeometrie beschreibt, einen wesentlichen Einfluß auf den radialen Stofftransport besitzt. Die Modellvorstellung, die der Berechnung des Stofftransports im Einzonenmodell zugrunde gelegt wurde (Kapitel 2), stellt die Scheibengeometrie im Vergleich zu anderen Koordinatendarstellungen vereinfacht dar und führt dadurch zu unrealistischeren Ergebnissen. Dort wurden Zylinder-Koordinaten für die Berechnung des Stofftransports angenommen. Die geeigneteren Koordinaten für die Darstellung der Scheibe dürften jedoch solche sein, die sich wie die Scheibe nach außen hin aufweiten. Dies ist beispielsweise bei Polar-Koordinaten und konkave Koordinaten der Fall.

4.4.2 Vergleich zwischen 1- und 2-dimensionalem Stofftransport

Es folgt nun der Vergleich zwischen Scheibenmodellen, in denen der Stofftransport einerseits in der Einzonennäherung und andererseits in 2-dimensionalen Polar-Koordinaten berechnet wurde. Es werden folgende Modelle verglichen:

(1) Das Einzonenmodell 1DRR (siehe Abschnitt 4.4.1).

(2) Das Einzonenmodell 1DRH (siehe Abschnitt 4.4.1).

(3) Das Modell 2DRR mit 2-dimensionalem Stofftransport in 2D Polar-Koordinaten, bei dem eine vereinfachte vertikale Scheibenstruktur angenommen wird.

Im Modell 2DRR wurden die vertikale Temperatur- und die vertikale Dichteschichtung jeweils durch Gaußprofile dargestellt (vergl. Glg. (4.3.5)). Die Werte von T_z und ρ_z in der Mittelebene sind dabei durch das Einzonenmodell vorgegeben. Diese Vorgehensweise erspart ein Vielfaches an Rechenzeit im Vergleich zu den Modellen mit 2-dimensionalem Stofftransport, bei denen die $1+1$-dimensionale Scheibenstruktur gemäß Kapitel 3 berechnet wird.

Darüber hinaus läßt sich auf diese Weise der radiale Stofftransport des 1-dimensionalen mit dem des 2-dimensionalen Modells direkt vergleichen, weil die Scheibenstrukturen des 1- und 2-dimensionalen Modells in der Mittelebene übereinstimmen. Dies ist i. A. nicht der Fall, wenn die vertikale Struktur gemäß Kapitel 3 berechnet wird (vergl. Abb. 3.5.4).

Abb. 4.4.2 zeigt das Ergebnis der Modellrechnungen (1) – (3). Es sind die radialen Verläufe von (a) $f_{\mathrm{cry,for}}$ und (b) f_{car} in der Mittelebene zu den üblichen Zeitpunkten $t = 0$, 10^5 und 10^6 a aufgetragen.

Radialer Verlauf von $f_{\mathrm{cry,for}}$ Wie sich in Abb. 4.4.2(a) erkennen läßt, liegt der radiale Verlauf von $f_{\mathrm{cry,for}}$ im Modell 2DRR im äußeren Scheibenbereich zwischen den Verläufen der Modelle 1DRR und 1DRH. Dieses Verhalten wird im Folgenden erklärt.

Die radialen Diffusionsterme in den Modellen 1DRR und 2DRR sind identisch. Da im Modell 2DRR die Vertikalgeschwindigkeit auf Null gesetzt ist, ist der Unterschied zwischen den Modellen 1DRR und 2DRR im äußeren Scheibenbereich einzig auf den *vertikalen* Diffusionsterm in der Transport-Reaktions-Gleichung des Modells 2DRR zurückzuführen. Die vertikale Diffusion führt in Modellen, in denen der 2-dimensionale Transport berechnet wird, also zu einem effizienteren radialen Stofftransport gegenüber Modellen, in denen lediglich der 1-dimensionale radiale Transport berechnet wird. Nach 10^6 a ist $f_{\mathrm{cry,for}}$ im Modell 2DRR gegenüber dem Modell 1DRR um bis zu $35\,\%$ erhöht (bei $r \approx 30\,\mathrm{AU}$).

Im mittleren Scheibenbereich ist bezüglich der Silikate ein zusätzlicher Mechanismus von Bedeutung. Dort, z.B. nach 10^6 a und zwischen ~ 0.4 und $3\,\mathrm{AU}$, ist die Konzentration des kristallinen Silikats im Modell 2DRR geringer als im Modell 1DRR. Dies liegt darin begründet, daß die Temperatur im vertikalen Modell mit der Höhe abnimmt. Dadurch werden die Silikate in größerer Höhe nicht so stark kristallisiert wie nahe der Mittelebene. Die vertikale Diffusion sorgt für einen beinahe vollständigen Ausgleich der Konzentrationsgradienten in vertikaler Richtung. Daher beträgt der Unterschied in der Konzentration von kristallinem Silikat zwischen der Mittelebene und dem Oberrand des Polarkoordinatengitters im Modell weniger als $5\,\%$! Das Mischen von weniger kristallisiertem Silikat in die Scheiben-Mittelebene sorgt folglich dafür, daß $f_{\mathrm{cry,for}}$ im Modell 2DRR verglichen mit dem Modell 1DRR im Bereich des Annealings der Silikate verringert ist.

Das radiale Auswärtsmischen von Stoffen im Modell 2DRR ist allerdings weniger effizient als im Modell 1DRH. Dies ist, wie bereits im vorigen Abschnitt erwähnt, auf die Selbstgravitation der Scheibe zurückzuführen. Diese beeinflußt den Stofftransport in konkaven Koordinaten.

Radialer Verlauf von f_{car} Der Kondensationsgrad von Kohlenstoff ist im Modell 2DRR gegenüber den Modellen 1DRR und 1DRH deutlich erhöht (Abb. 4.4.2(b)). Nach 10^6 a und bei $0.2\,\mathrm{AU}$ z.B. beträgt f_{car} im Modell 2DRR 0.132, während der entsprechende Wert im Modell 1DRR bei 0.047 liegt.

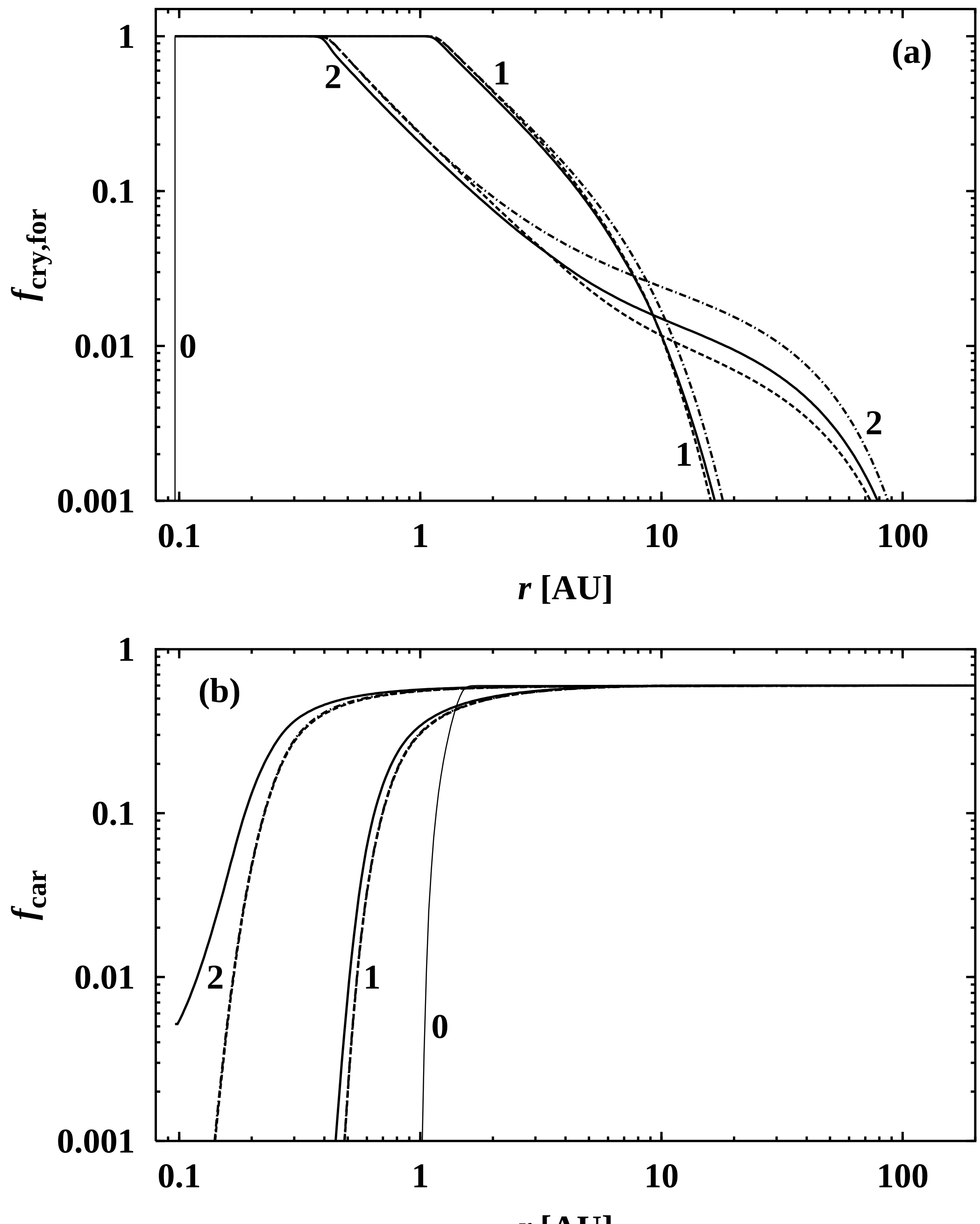


Abbildung 4.4.2: Vergleich zwischen 1- und 2-dimensionalem Stofftransport. Durchgezogene Linien: Modell 2DRR mit 2-dimensionalem Stofftransport in Polar-Koordinaten (r', θ) und vereinfachter vertikaler Struktur. Gestrichelte Linien: Einzonenmodell 1DRR in Polar-Koordinaten (r', θ). Strichpunkt-Linien: Einzonenmodell 1DRH in konkaven Koordinaten (s, q). **(a)** Kristallisationsgrad von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$. **(b)** Kondensationsgrad von C in Ruß f_{car}. Es sind jeweils die Ergebnisse nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und 10^6 a (2) aufgetragen. Beachte, daß die Kurven für f_{car} in den Modellen 1DRR und 1DRH übereinander liegen. Weitere Details siehe Text.

Die Ursache für diese Abweichung ist auf zwei Mechanismen zurückzuführen: Zum einen führt die vertikale Diffusion im Modell 2DRR zu einem effizienteren radialen diffusiven

Stofftransport als im Modell 1DRR, wie bereits im Falle der Silikate erläutert. Zum anderen sorgt die vertikale Diffusion sowie der vertikale Temperaturgradient im Modell 2DRR dafür, daß Materie, in der Kohlenstoffstaub in geringem Umfang verbrannt ist, aus größerer Höhe in die Mittelebene transportiert wird und sich dort mit Materie vermischt, in der der Kohlenstoffstaub in größerem Umfang verbrannt ist. Die mit der Höhe abnehmende Effizienz der Kohlenstoffverbrennung und das vertikale Mischen führen folglich zu einer Vergrößerung von $f_{\rm car}$ im Modell 2DRR gegenüber dem Modell 1DRR. Bei der Kristallisation ist der Effekt gleichfalls der, daß weniger kristallisierter Staub aus höheren Schichten zu stärker kristallisiertem Staub in der Mittelebene gemischt wird und dort den Anteil an amorphem Staub erhöht.

Fazit des Abschnitts Das wesentliche Resultat dieses Abschnitts ist, daß der 2-dimensionale Stofftransport eine stärkere radiale Ausbreitung von Tracern ermöglicht, als dies beim 1-dimensionalen radialen Stofftransport mit vergleichbarer Scheibengeometrie der Fall ist. Die Stoffkonzentrationen im äußeren Scheibenbereich sind beim 2-dimensionalen Stofftransport daher um einige $10\,\%$ größer als beim 1-dimensionalen Stofftransport.

4.4.3 2D Stofftransport mit vertikal konstantem Geschwindigkeitsfeld

Die beiden ersten Abschnitte der Ergebnisdiskussion haben dazu gedient, zum einen den Einfluß der Scheibengeometrie auf den Stofftransport und zum anderen die Unterschiede zwischen dem 1-dimensionalen und dem 2-dimensionalen Stofftransport zu verdeutlichen. In den verbleibenden Abschnitten sollen die Ergebnisse von Modellen mit 2-dimensionalem Stofftransport diskutiert werden, denen die vollständige 1+1-dimensionale Scheibenstruktur (Kapitel 3) zugrunde gelegt wurde.

In diesem Abschnitt werden folgende Modelle verglichen:

(1) Das Modell 2DRR mit 2-dimensionalem Stofftransport, bei dem eine vereinfachte vertikale Scheibenstruktur angenommen wird (siehe Abschnitt 4.4.2).

(2) Das Modell 2DS0 mit 2-dimensionalem Stofftransport, bei dem die vollständige 1+1-dimensionale Scheibenstruktur *ohne* globale Iteration berechnet wird.

(3) Das Modell 2DST mit 2-dimensionalem Stofftransport, bei dem die vollständige 1+1-dimensionale Scheibenstruktur *mit* globaler Iteration berechnet wird.

In allen Modellen wird ein vertikal konstantes Geschwindigkeitsfeld angenommen. Dieses ist durch Glg. (4.3.1) gegeben und in Abb. 4.3.1 zum Zeitpunkt $t = 0$ der Rechnung veranschaulicht.

In Abb. 4.4.3 ist das Ergebnis dieser Modellrechnungen dargestellt. Es sind wieder die radialen Verläufe von (a) $f_{\rm cry,for}$ und (b) $f_{\rm car}$ in der Mittelebene aufgetragen, aber nun zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2). Die Wahl $6.5 \cdot 10^5$ a liegt darin begründet, daß die zeitaufwändige Modellrechnung 2DST mit globaler Iteration (vergl. Abb. 4.2.2) zum Zeitpunkt der Niederschrift dieser Arbeit lediglich diese Entwicklungszeit erreicht hatte. Dies beeinträchtigt die Ergebnisdiskussion jedoch nur unwesentlich.

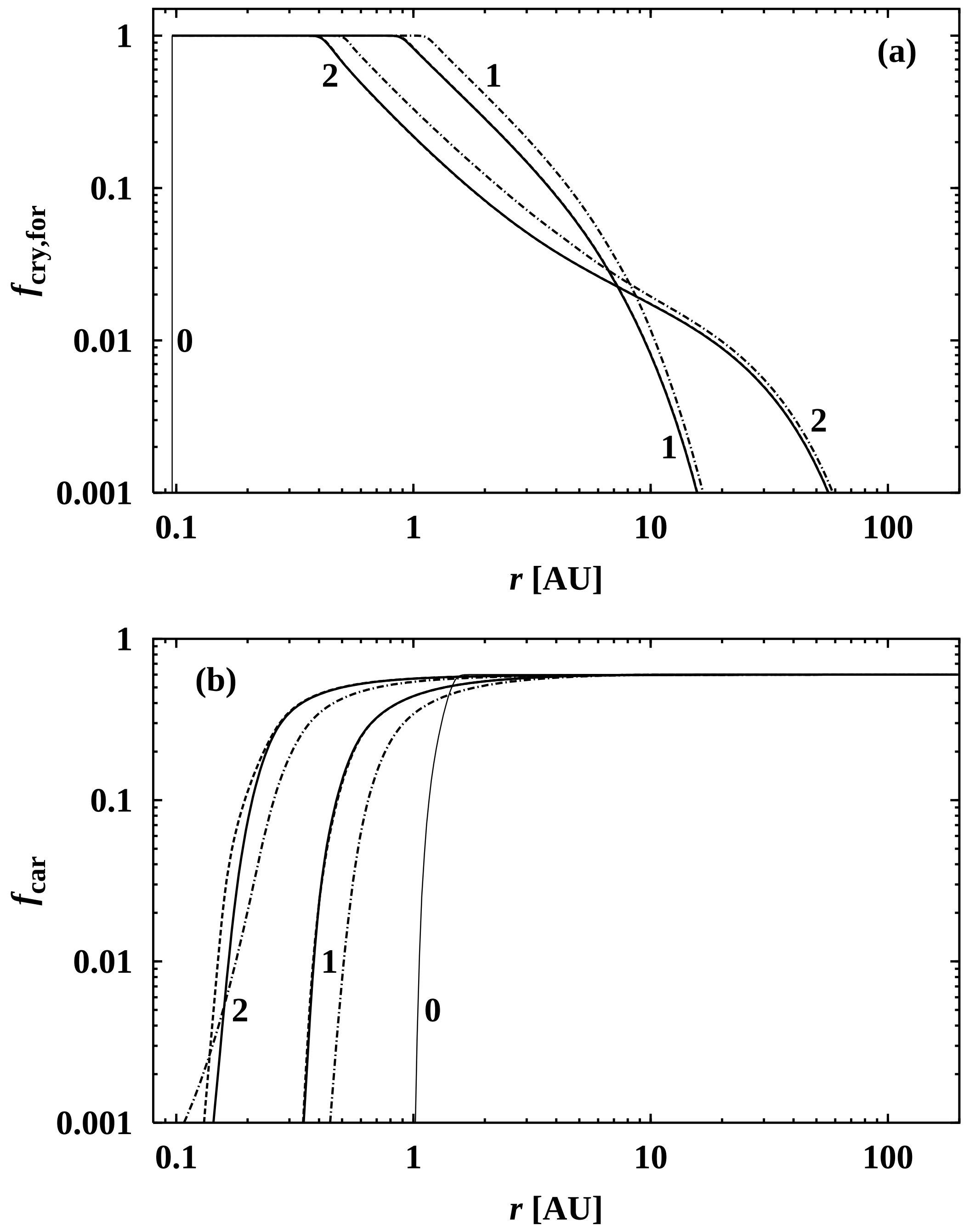


Abbildung 4.4.3: Vergleich zwischen Modellen mit 2-dimensionalem Stofftransport in Polar-Koordinaten mit vertikal konstantem Geschwindigkeitsfeld. Strichpunkt-Linien: Modell 2DRR mit vereinfachter vertikaler Struktur. Gestrichelte Linien: Modell 2DS0 mit voller 1+1-dimensionaler Scheibenstruktur ohne globale Iteration. Durchgezogene Linien: Modell 2DST mit voller 1+1-dimensionaler Scheibenstruktur mit globaler Iteration. **(a)** Kristallisationsgrad von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$. **(b)** Kondensationsgrad von C in Ruß f_{car}. Es sind jeweils die Ergebnisse nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2) aufgetragen. Beachte, daß die Kurven für $f_{\mathrm{cry,for}}$ der Modelle 2DS0 und 2DST übereinander liegen. Für weitere Details siehe Text.

Modelle 2DRR und 2DS0 Es sollen zunächst die Modelle 2DRR und 2DS0 verglichen werden. In diesen Modellen stimmen sowohl die Advektionsterme als auch die Diffusionsterme in den Transport-Reaktions-Gleichungen überein. Da auch die Geschwindigkeitsfelder der beiden Modelle identisch sind, besteht der einzige Unterschied zwischen den Modellen in deren unterschiedlicher Scheibenstruktur. In Modell 2DS0 wurde der volle Satz von vertikalen Scheibengleichungen (3.3.1) – (3.3.11) gelöst. Dagegen wurden in Modell 2DRR vereinfachende Gaußprofile für die Temperatur- und Dichteschichtung angenommen, bei denen das Einzonenmodell die Werte der Temperatur und der Dichte in der Mittelebene vorgibt. Sowohl die radiale als auch die vertikale Struktur der Modelle 2DRR und 2DS0 sind also gänzlich voneinder verschieden (ähnlich wie in Abb. 3.5.4).

Im chemisch aktiven Scheibenbereich ist das Modell 2DRR heißer und dichter als das Modell 2DS0. Dies führt dazu, daß sowohl die Kristallisationsfront der Silikate (Abb. 4.4.3(a)) als auch die Verbrennungsfront des Kohlenstoffstaubs (Abb. 4.4.3(b)) im Modell 2DS0 gegenüber dem Modell 2DRR nach innen verschoben ist. Als Folge gelangt im Modell 2DS0 weniger kristallines Silikat in die äußeren Scheibenregionen als im Modell 2DRR. Dafür sind allein die unterschiedlichen Scheibenstrukturen der beiden Modelle verantwortlich.

Die Ursache für die ‚Ausbuchtung', die der Verlauf von $f_{\rm car}$ im Modell 2DRR nach $6.5\cdot10^5\,{\rm a}$ zwischen 0.1 und $0.2\,{\rm AU}$ aufweist, liegt möglicherweise in Details der unterschiedlichen vertikalen Struktur der Modelle begründet.

Modelle 2DS0 und 2DST Die Modelle 2DS0 und 2DST sind im äußeren Scheibenbereich nicht nennenswert verschieden (Abb. 4.4.3(a)). Dies ist erfreulich, denn damit kann man für die Modellierung der äußeren Scheibenregionen darauf verzichten, die globale Iteration des 2-dimensionalen Modells auszuführen (siehe Abb. 4.2.2), und somit beachtlich Rechenzeit einsparen.

Im inneren Scheibenbereich liegt eine andere Situation vor (Abb. 4.4.3(b)). In der Zone der Kohlenstoffverbrennung schaukelt sich im Modell 2DS0 im Laufe der Zeit eine numerische Instabilität auf. Die vertikale Scheibenstruktur wechselt dort zwischen unterschiedlichen Lösungen: Zum Zeitpunkt t_1 ist die vertikale Schichtung kalt, die ${\rm OH}$-Konzentration niedrig und $f_{\rm car}$ in vertikaler Richtung annähernd konstant. Zum Zeitpunkt $t_1 + \Delta t$, d.h. nach Ausführung des Zeitschritts Δt, ist die vertikale Schichtung heiß, die ${\rm OH}$-Konzentration hoch, und $f_{\rm car}$ weist einen ausgeprägten vertikalen Gradienten auf. Der Wert von $f_{\rm car}$ liegt dann in der Mittelebene unter und am Oberrand über dem Wert des Zeitpunkts t_1. Zum Zeitpunkt $t_1 + 2\Delta t$ ist die Situation schließlich wieder vergleichbar mit der Situation zum Zeitpunkt t_1 (jedoch nicht identisch). Die maximale Temperaturdifferenz zwischen den beiden Lösungen nach $6.5 \cdot 10^5\,{\rm a}$ liegt in der Mittelebene bei $\sim 180\,{\rm K}$ und wächst mit fortschreitender Zeit langsam an.

Die Ursache für diese numerische Instabilität liegt wahrscheinlich in einem Wechselspiel zwischen der Opazität, der Temperatur und der Effizienz der Kohlenstoffverbrennung begründet. Steigt die Temperatur an, so vergrößert sich die ${\rm OH}$-Konzentration. Dadurch wird der Kohlenstoffstaub effizienter verbrannt und die Opazität in der Verbrennungszone des Kohlenstoffstaubs verringert. Dies wiederum verursacht dort eine effizientere Kühlung der Scheibe. Daraufhin verringert sich die ${\rm OH}$-Konzentration, und es kann Kohlenstoffstaub, der weniger prozessiert ist, aus benachbarten Gebieten in die Verbrennungszone des Kohlenstoffstaubs gemischt werden. Auf diese Weise vergrößert sich die Opazität und somit die Temperatur, und der Kreislauf beginnt von neuem.

Im Modell 2DST mit globaler Iteration wird die numerische Instabilität deutlich gedämpft. Die Genauigkeit der globalen Iteration von $\Delta_{\rm gl} = 5 \cdot 10^{-3}$ läßt die Temperaturschwankungen zwischen zwei Zeitschritten nicht größer als $\sim 5\,\mathrm{K}$ werden. Wie bereits erwähnt ist der Wert von Δ_{gl} im Modell grundsätzlich durch die Fehler, die durch die Interpolation zwischen den unterschiedlichen Gittern hervorgerufen werden, nach unten begrenzt. Die Temperaturschwankungen von $\sim 5\,\mathrm{K}$, die im Bereich der Kohlenstoffverbrennung zwischen zwei Zeitschritten auftreten, müssen im Modell folglich in Kauf genommen werden.

Abb. 4.4.3(b) zeigt den Unterschied zwischen den Modellen 2DS0 und 2DST im Bereich der numerischen Instabilität. Zum Zeitpunkt $t = 6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ befindet sich das Modell 2DS0 gerade im Lösungszweig mit niedriger Temperatur. Daher ist f_{car} im Vergleich zum Modell 2DST erhöht. Der Lösungszweig im Modell 2DS0 mit höherer Temperatur ist der Lösung des Modell 2DST ähnlich. Die radialen Verläufe von f_{car} sind in den beiden Modellen dann vergleichbar (in Abb. 4.4.3(b) nicht gezeigt).

Eine genauere Überprüfung des Transports der Silikate im Modell 2DS0 offenbart, daß die beschriebene numerische Instabilität in der Umgebung der Kristallisationsfront der Silikate ebenfalls wirksam ist. Die Schwankungen von $f_{\mathrm{cry,for}}$ zwischen zwei Zeitschritten betragen nach $6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ maximal $\sim 5\,\%$. Die Schwankungen der Zentral-Temperatur fallen geringer aus und liegen unter $2\,\%$. Im äußeren Scheibenbereich sind die Scheibenstrukturen der Modelle 2DS0 und 2DST allerdings beinahe identisch. Nach $6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ liegt der Unterschied zwischen den Modellen bei $r > 3\,\mathrm{AU}$ unterhalb von $0.1\,\%$.

Fazit des Abschnitts Die Diskussion der Modelle 2DS0 und 2DST zeigt, daß die Scheibenstruktur in der Zone der Kohlenstoffverbrennung nur mit Hilfe einer globalen Iteration selbstkonsistent mit dem Stofftransport berechnet werden kann. Die numerische Instabilität im Modell 2DS0 ohne globale Iteration führt zu nicht akzeptablen Fehlern in der Lösung. In Modellen, in denen lediglich das Annealing und der Transport der Silikate berücksichtigt sind, kann auf die globale Iteration jedoch verzichtet werden, falls die Anforderung an die Genauigkeit der Ergebnisse im Bereich des Annealings der Silikate nicht allzu groß ist. In den äußeren Scheibenregionen liegt der Unterschied zwischen den Modellen mit und ohne globale Iteration bei unter einem Promill.

4.4.4 2D Stofftransport mit meridionalem Geschwindigkeitsfeld

In diesem Abschnitt werden nun Modelle mit 2-dimensionalem Stofftransport verglichen, deren 2-dimensionale Flußstruktur sich unterscheidet. Die Scheibenstruktur der verschiedenen Modelle wird jeweils mit Hilfe des vollen $1{+}1$-dimensionalen Modells gemäß Kapitel 3 berechnet. Im Einzelnen werden folgende Modelle untersucht:

(1) Das Modell 2DST, bei dem die globale Iteration ausgeführt und ein vertikal konstantes Geschwindigkeitsfeld angenommen wird (siehe Abschnitt 4.4.3).

(2) Das Modell 2DV0 *ohne* globale Iteration, bei dem ein meridionales Geschwindigkeitsfeld angenommen wird.

(3) Das Modell 2DVT *mit* globaler Iteration, bei dem ein meridionales Geschwindigkeitsfeld angenommen wird.

Das meridionale Geschwindigkeitsfeld in der Scheibe ist durch Glgen. (4.3.10) und (4.3.11) gegeben sowie in Abb. 4.3.2 zum Zeitpunkt $t = 0$ der Rechnung dargestellt. Der

Tabelle 4.4.2: Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit, $f_{\rm cry,for}$ bzw. $f_{\rm cry,ens}$, in den Modellen 2DST und 2DVT zu angegebenen Zeitpunkten t bei unterschiedlichen radialen Abständen r (vergl. Tab. 2.8.2).

	Modell 2DST			Modell 2DVT		
$f_{\rm cry,for}$	5 AU	10 AU	20 AU	5 AU	10 AU	20 AU
10^5 a	0.056	$8.0 \cdot 10^{-3}$	$1.9 \cdot 10^{-4}$	0.248	0.037	$4.6 \cdot 10^{-4}$
$6.5 \cdot 10^5$ a	0.031	0.017	$8.9 \cdot 10^{-3}$	0.203	0.075	0.016
$f_{\rm cry,ens}$	5 AU	10 AU	20 AU	5 AU	10 AU	20 AU
10^5 a	0.043	$5.9 \cdot 10^{-3}$	$1.3 \cdot 10^{-4}$	0.231	0.032	$3.6 \cdot 10^{-4}$
$6.5 \cdot 10^5$ a	0.024	0.014	$6.9 \cdot 10^{-3}$	0.196	0.073	0.015

radiale Temperaturexponent λ wird dabei lokal und zu jedem Zeitpunkt der Rechnung neu aus dem Einzonenmodell bestimmt.[1]

In Abb. 4.4.4 sind die Ergebnisse der Modellrechnungen (1) – (3) dargestellt. Dabei sind wie im vorhergehenden Abschnitt die radialen Verläufe in der Mittelebene von (a) $f_{\rm cry,for}$ und (b) $f_{\rm car}$ zu den Zeitpunkten $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2) aufgetragen.

Modelle 2DV0 und 2DVT Das Modell 2DV0 weist die gleiche numerische Instabilität auf wie das Modell 2DS0, d.h. die Scheibenstruktur zwischen zwei Zeitschritten wechselt zwischen unterschiedlichen Lösungen (siehe vorhergehender Abschnitt). Die numerische Instabilität ist im Bereich der Kohlenstoffverbrennung besonders ausgeprägt und liefert dort inakkurate Ergebnisse. Aus diesem Grund ist das Modell 2DVT mit globaler Iteration dem Modell 2DV0 ohne globale Iteration vorzuziehen.

Allerdings stimmen die Kurven der Modelle 2DV0 und 2DVT in Abb. 4.4.4 beinahe überein, mit Ausnahme der innersten $\sim 0.2\,\mathrm{AU}$ nach $6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$, wo die Kurven der Modelle 2DV0 und 2DST übereinander liegen. Dies ist darauf zurückzuführen, daß sich das Modell 2DV0 nach $6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ gerade im Lösungszweig mit höherer Temperatur befindet, bei dem die iterierten und nicht-iterierten Scheibenstrukturen sehr ähnlich sind. Im Lösungszweig mit niedriger Temperatur stellen sich im Modell 2DV0 Abweichungen vom Modell 2DVT ein, die von gleicher Größenordnung sind wie die Abweichung des Modells 2DS0 vom Modell 2DST (siehe Abb. 4.4.3).

Modelle 2DST und 2DVT: radialer Verlauf von $f_{\rm cry,for}$ Anhand der Modelle 2DST und 2DVT läßt sich direkt vergleichen, welchen Einfluß das meridionale Geschwindigkeitsfeld auf den Stofftransport in der protoplanetaren Scheibe besitzt. Wie sich anhand von Abb. 4.4.4 erkennen läßt, ist der Einfluß des Strömungsfeldes auf den radialen Stofftransport in der Scheibe immens.

Dies zeigt besonders deutlich der radiale Verlauf des Kristallisationsgrads von Forsterit (Abb. 4.4.4(a); für Enstatit ergibt sich ein vergleichbares Bild). Das meridionale Strömungsfeld führt dazu, daß $f_{\rm cry,for}$ im Modell 2DVT zum Zeitpunkt $t = 6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ um bis zu einem Faktor von ~ 7 größer ist als im Modell 2DST (bei $r \approx 4\,\mathrm{AU}$)! Einige Werte

[1] Tatsächlich wäre es im Rahmen des 2-dimensionalen Modells konsistenter gewesen, λ statt aus dem Einzonenmodell aus dem radialen Verlauf der Zentral-Temperatur des *vertikalen* Modells zu bestimmen (vergl. Abb. 3.5.4). Zusätzlich kann man das meridionale Geschwindigkeitsfeld in Abhängigkeit vom vertikalen Temperaturexponenten analytisch darstellen. Dies soll zukünftigen Untersuchungen vorbehalten sein.

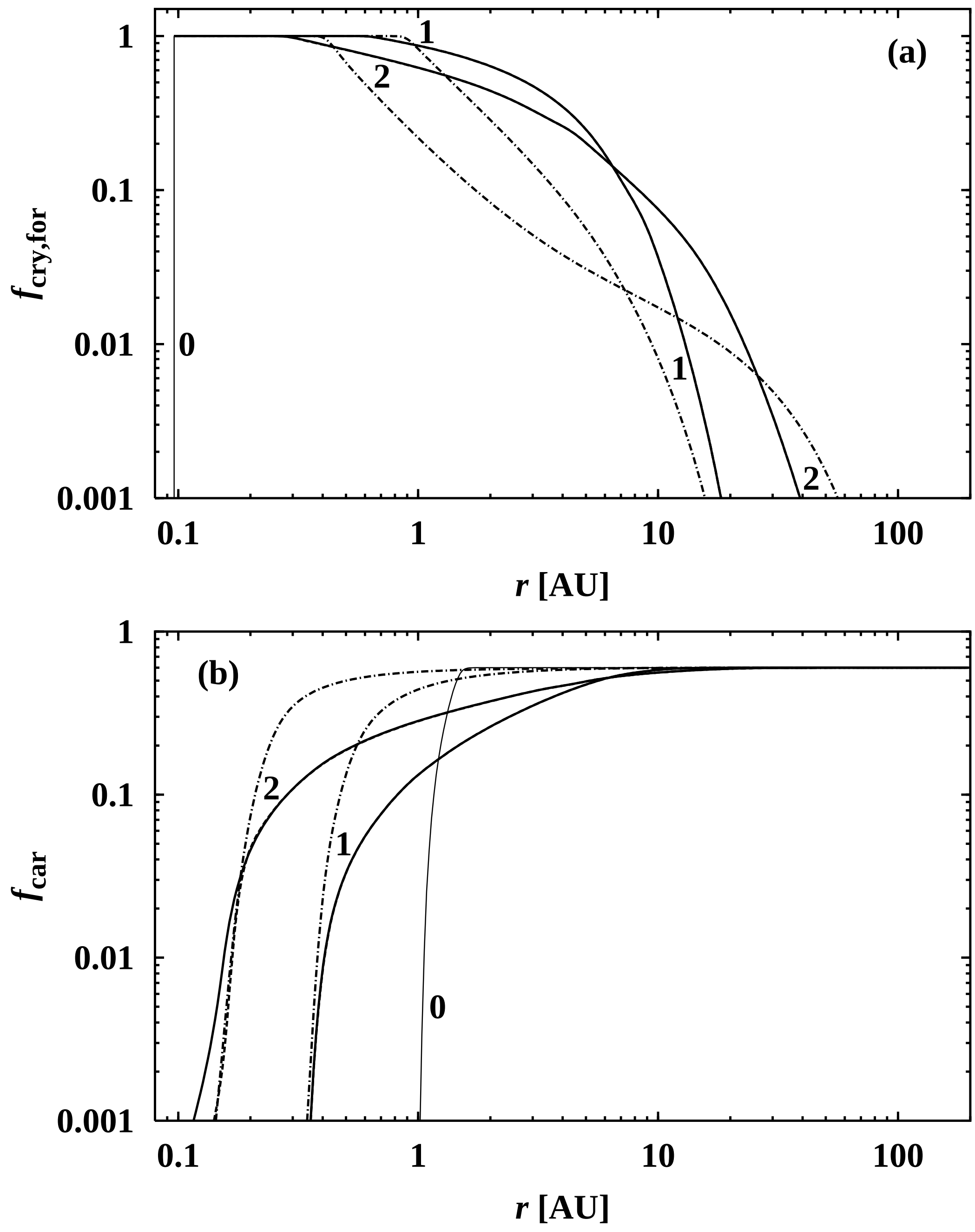


Abbildung 4.4.4: Vergleich zwischen Modellen mit 2-dimensionalem Stofftransport in Polar-Koordinaten mit voller 1+1-dimensionaler Scheibenstruktur, bei denen unterschiedliche Geschwindigkeitsfelder angenommen wurden. Strichpunkt-Linien: Modell 2DST mit globaler Iteration und mit vertikal konstantem Geschwindigkeitsfeld. Gestrichelte Linien: Modell 2DV0 ohne globale Iteration und mit meridionalem Geschwindigkeitsfeld. Durchgezogene Linien: Modell 2DVT mit globaler Iteration und mit meridionalem Geschwindigkeitsfeld. **(a)** Kristallisationsgrad von Forsterit $f_{\mathrm{cry,for}}$. **(b)** Kondensationsgrad von C in Ruß f_{car}. Es sind jeweils die Ergebnisse nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2) aufgetragen. Beachte, daß die Kurven der Modell 2DV0 und 2DVT übereinander liegen, mit einer Ausnahme. Zum Zeitpunkt $t = 6.5 \cdot 10^5$ a liegt die Kurve des Modells 2DV0 für $r \lesssim 0.2$ AU über der Kurve des Modells 2DST. Für weitere Details siehe Text.

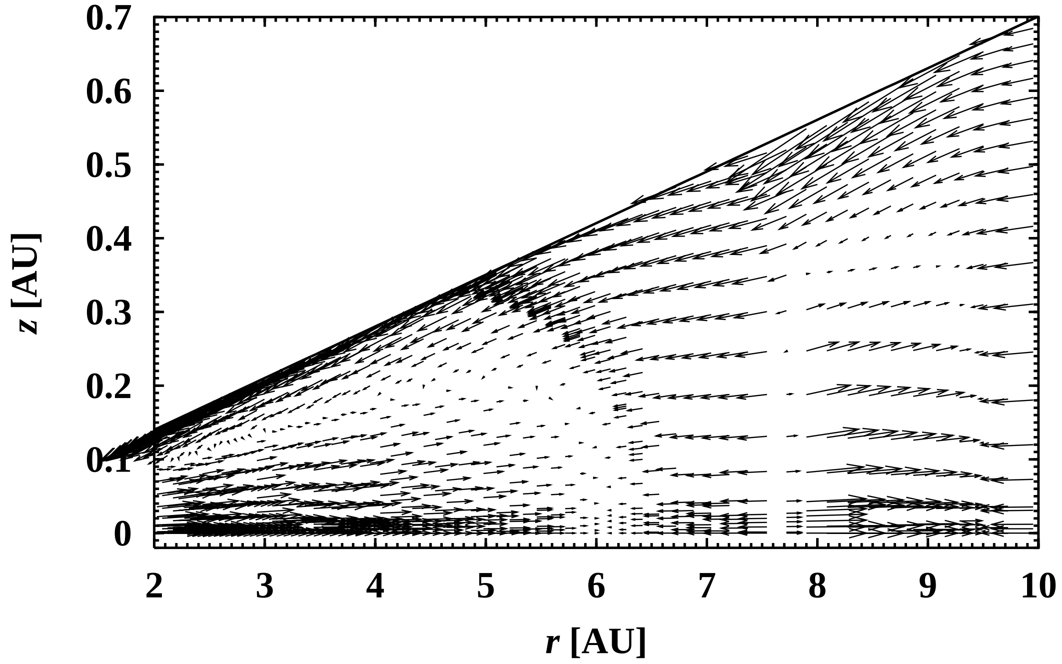


Abbildung 4.4.5: 2-dimensionales meridionales Geschwindigkeitsfeld der Scheibe zwischen 2 und 10 AU zum Zeitpunkt $t = 10^5$ a im Modell 2DVT. Die Länge der Vektoren ist proportional zum Betrag der Geschwindigkeit. Die durchgezogene Linie zeigt den oberen Rand des Polarkoordinaten-Gitters ($\theta_1 = 4.01°$). Der Streckungsfaktor für die Vektoren ist identisch mit dem in Abben. 4.3.1 und 4.3.2.

für die Kristallisationsgrade von Forsterit und Enstatit in den Modellen 2DST und 2DVT zu unterschiedlichen Zeitpunkten und bei unterschiedlichen radialen Abständen sind in Tabelle 4.4.2 aufgeführt.

Zum besseren Verständnis des radialen Transports der kristallinen Silikate in den Modellen 2DST und 2DVT ist in Abb. 4.4.5 die Flußstruktur der Scheibe dargestellt, die im Modell 2DVT zum Zeitpunkt $t = 10^5$ a im Bereich von 2 bis 10 AU vorliegt. Die Abbildung läßt sich direkt mit den Abben. 4.3.1 und 4.3.2 vergleichen, welche die Flußstrukturen der Modelle 2DST und 2DVT zur Zeit $t = 0$ zeigen.

Abb. 4.4.5 zufolge ergibt sich im Modell 2DVT zur Zeit $t = 10^5$ a folgendes Bild für die radiale Driftgeschwindigkeit v_r in der Scheiben-Mittelebene:

(i) Für $r \lesssim 6$ AU ist v_r positiv, da dort der Temperaturexponent $\lambda < \frac{6}{5}$ ist (vergl. Glg. (4.3.10)).

(ii) Im Bereich $6\,\mathrm{AU} \lesssim r \lesssim 7.5\,\mathrm{AU}$ ist v_r negativ. Dort ist die Opazität eine fallende Funktion von r, so daß ein Temperaturverlauf mit $\lambda > \frac{6}{5}$ folgt (vergl. Abben. 2.8.4(a) und 2.8.5(a)).

(iii) Im Bereich $7.5\,\mathrm{AU} \lesssim r \lesssim 9.5\,\mathrm{AU}$ ist v_r positiv, weil die Kondensationsfront von Eis zu einem Temperaturplateau führt und somit $\lambda > \frac{6}{5}$ gilt.

(iv) Im Bereich $9.5\,\mathrm{AU} \lesssim 22\,\mathrm{AU}$ ist v_r aus gleichem Grund wie in (ii) negativ.

(v) Schließlich ist v_r für $r \gtrsim 22$ AU positiv, da sich dort die Temperatur in der Scheibe der Umgebungstemperatur anpaßt ($T_{\mathrm{cloud}} = 20\,\mathrm{K}$) und daher $\lambda < \frac{6}{5}$ gilt.

Im Bereich der Abb. 4.4.5 wird die Radialgeschwindigkeit in der Mittelebene vom Betrage her bei $\sim 7.9\,\mathrm{AU}$ maximal und beträgt dort $\sim 27\,\mathrm{cm\,s^{-1}}$ (Bereich (iii)).

Mit der Zeit wandern die Bereiche (i) – (v) aufgrund des Akkretionsprozesses nach innen (vergl. Abb. 4.3.2). Darüber hinaus sorgt die diffusionsartige Ausbreitung der Scheibe dafür, daß der radiale Temperaturverlauf mit der Zeit abflacht. Auf diese Weise verschmälern sich die Bereiche (ii) und (iv) im Laufe der Scheibenentwicklung. Die Flußstruktur (i) – (v) in der Region um die Eisfront herum bleibt jedoch mehr als $10^6\,\mathrm{a}$ stabil.

Das Annealing der Silikate findet zu allen Zeiten der Scheibenentwicklung im Bereich (i) statt. Daher wird kristallines Silikat im Modell 2DVT sehr effizient in die äußeren Scheibenregionen transportiert. Das meridionale Strömungsfeld ist dabei zusätzlich zum diffusiven radialen Auswärtsmischen wirksam. Entscheidend für den Stofftransport im meridionalen Strömungsfelds ist aber, daß der Massenfluß in der Scheibe nahe der Mittelebene größer ist als nahe der Scheiben-Oberfläche, da die Massendichte mit zunehmender Höhe abnimmt. In größerer Höhe wird aus diesem Grund in den Bereichen (i) und (iii), obwohl dort v_r negativ ist, weniger kristallines Silikat advektiv einwärts transportiert als nahe der Mittelebene auswärts transportiert wird. Dies stellt den eigentlichen Grund dar, infolge dessen sich der Stofftransport in die äußeren Scheibenregionen beim meridionalen Geschwindigkeitsfeld als so effizient erweist.

Interessanterweise wird im Bereich (ii) der Stofftransport nach außen kaum aufgehalten. Offensichtlich kann dieser Bereich mit $v_r < 0$ nahe der Mittelebene durch rein diffusiven Transport überwunden werden. Auf andere Weise läßt sich das Auswärtsmischen der kristallinen Silikate bis weit über den Bereich (ii) hinaus nicht erklären (Abb. 4.4.4(a)). Im Bereich (iv) allerdings ist ein merkliches Abknicken im Verlauf von $f_{\mathrm{cry,for}}$ zu erkennen. In den Bereich (iv) vermag das kristalline Silikat demzufolge nicht sehr tief auf diffusive Weise einzudringen. Das Strömungsfeld der Scheibe sorgt folglich dafür, daß der Auswärtstransport von Tracern im Bereich (iv) nahezu zum Stillstand kommt.

Im Modell 2DST ist im Gegensatz zum Modell 2DVT in weiten Bereichen der Scheibe v_r negativ. Der Ort r_v, bei dem die Radialgeschwindigkeit ihr Vorzeichen wechselt und für $r > r_v$ positiv wird, liegt weit außen in der Scheibe. Beispielsweise befindet sich r_v nach $10^5\,\mathrm{a}$ bei $13.5\,\mathrm{AU}$ und nach $6.5 \cdot 10^5\,\mathrm{a}$ bei $26.5\,\mathrm{AU}$. Dies begünstigt den Auswärtstransport von Tracern im Modell 2DST nur geringfügig und führt dazu, daß $f_{\mathrm{cry,for}}$ im Modell 2DST weit außen in der Scheibe größer als im Modell 2DVT wird. Für die Scheibenbereiche mit $r < r_v$ erfolgt der Auswärtstransport von Tracern im Modell 2DST allerdings ausschließlich durch Diffusion und ist daher wesentlich ineffizienter als im Modell 2DVT.

Modelle 2DST und 2DVT: radialer Verlauf von f_{car} Der radiale Verlauf des Kondensationsgrads von Kohlenstoff, f_{car}, in Abb. 4.4.4(b) verdeutlicht, wie sich der Stofftransport der Modelle mit vertikal konstantem und meridionalem Strömungsfeld im inneren Bereich der Scheibe darstellt.

Zunächst stellt man fest, daß sich die schmale Zone, in der die letzten Kohlenstoffteilchen durch OH verbrennen, in den Modellen 2DST und 2DVT zu verschiedenen Entwicklungszeiten an relativ ähnlichen Positionen befindet. Dies ist eine Konsequenz daraus, daß dort die OH-Dichte in beiden Modellen sehr ähnlich ist.

Die Kohlenstoffteilchen werden jedoch infolge des meridionalen Strömungsfeldes wesentlich stärker durch radiales Mischen mit den Verbrennungsprodukten verdünnt als dies beim vertikal konstanten Strömungsfeld der Fall ist. Dies liegt vornehmlich daran, daß

Tabelle 4.4.3: Kondensationsgrad von C in Kohlenstoffstaub, $f_{\rm car}$, in den Modellen 2DST und 2DVT zu angegebenen Zeitpunkten t bei unterschiedlichen radialen Abständen r.

	Modell 2DST			Modell 2DVT		
$f_{\rm car}$	0.5 AU	1 AU	3 AU	0.5 AU	1 AU	3 AU
10^5 a	0.132	0.441	0.572	0.033	0.132	0.351
$6.5 \cdot 10^5$ a	0.499	0.566	0.591	0.188	0.283	0.430

im Modell 2DVT bis zum Innenrand der Scheibe $v_r(z = 0) > 0$ gilt. Dort liegt während der überwiegenden Entwicklungsdauer der Scheibe ein Temperaturplateau vor, welches durch den Abfall der Opazität bei der Staubverdampfung hervorgerufen wird. Daher gilt dort $\lambda \ll \frac{6}{5}$, so daß der Faktor $f(r)$ in Glg. (4.3.10) keine Umkehrung des Strömungsfeldes nahe des Scheiben-Innenrands bewirken kann.

Einige Werte für $f_{\rm car}$ zu unterschiedlichen Zeitpunkten und radialen Entfernungen sind in Tab. 4.4.3 gezeigt. Die Eisfront liegt in den Modellen 2DST und 2DVT nach $6.5 \cdot 10^5$ a bei ~ 3 AU. Dies bedeutet, daß die Verbrennungsprodukte des Kohlenstoffstaubs im Modell 2DVT in beträchtlichen Mengen bis über die Eisfront hinaus gelangen.

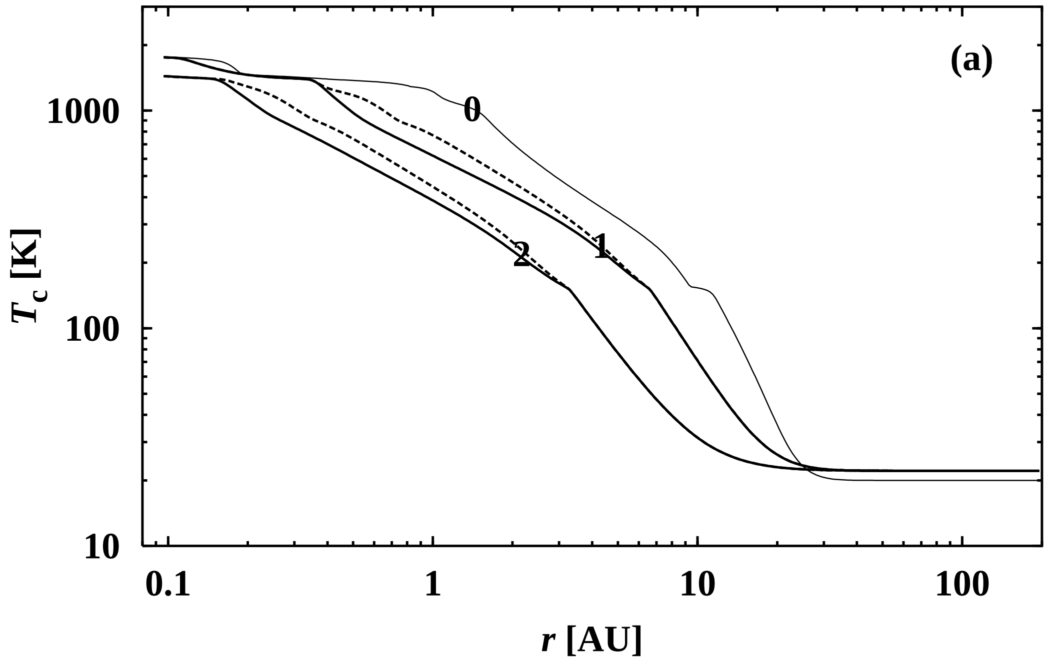
Fazit des Abschnitts Mit Hilfe des meridionalen Strömungsfeldes der protoplanetaren Akkretionsscheibe läßt sich erklären, daß einige Kometen kristallines Silikat in Anteilen von über $10\,\%$ am Gesamtsilikat enthalten. Ein Anteil von $10\,\%$ an kristallinem Silikat wird im Modell 2DVT jenseits der Eisfront, d.h. dort, wo die Kometen im solaren Nebel entstanden sind, über einen langen Zeitraum der Scheibenentwicklung aufrecht erhalten (siehe Tab. 4.4.2). Das vertikal konstante Strömungsfeld im Modell 2DST hingegen vermag den hohen Anteil an kristallinem Silikat in den Kometen nicht zu erklären: in diesem Modell beträgt der Kristallisationsgrad jenseits der Eisfront während der Scheibenentwicklung stets $< 10\,\%$.

Der Stofftransport im meridionalen Strömungsfeld bietet außerdem eine Erklärung für das Methan in den Kometen. Die Bereiche im solaren Nebel jenseits der Eisfront sind zu kalt gewesen, als daß dort Methan auf chemischem Wege in großen Mengen hätte entstehen können. Methan, das dagegen als Verbrennungsprodukt der Kohlenstoffverbrennung in den inneren Zonen der Scheibe entstanden ist, kann durch radialen Transport bis über die Eisfront hinaus gelangt sein (Gail 2002). Auf diese Weise konnte das Methan möglicherweise in die Kometen eingebaut werden.

4.4.5 Scheibenstruktur im Modell mit meridionalem Strömungsfeld

Radiale Struktur Abb. 4.4.6 zeigt den Verlauf (a) der Temperatur $T_{\rm z}$ und (b) der Massendichte $\rho_{\rm z}$ in der Mittelebene ($z = 0$) nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2).

Wie bereits anhand Abb. 4.4.4 diskutiert wurde, sorgt das meridionale Strömungsfeld im mittleren und äußeren Scheibenbereich dafür, daß dort zum einen die Konzentration der kristallinen Silikate vergrößert und zum anderen die Konzentration des Kohlenstoffstaubs verringert wird. Beides führt dort zu einer Verminderung der Opazität. Dadurch kann die Scheibe im Vergleich zu Modell 2DST effizienter ihre Energie abstrahlen und kühlt somit stärker ab.



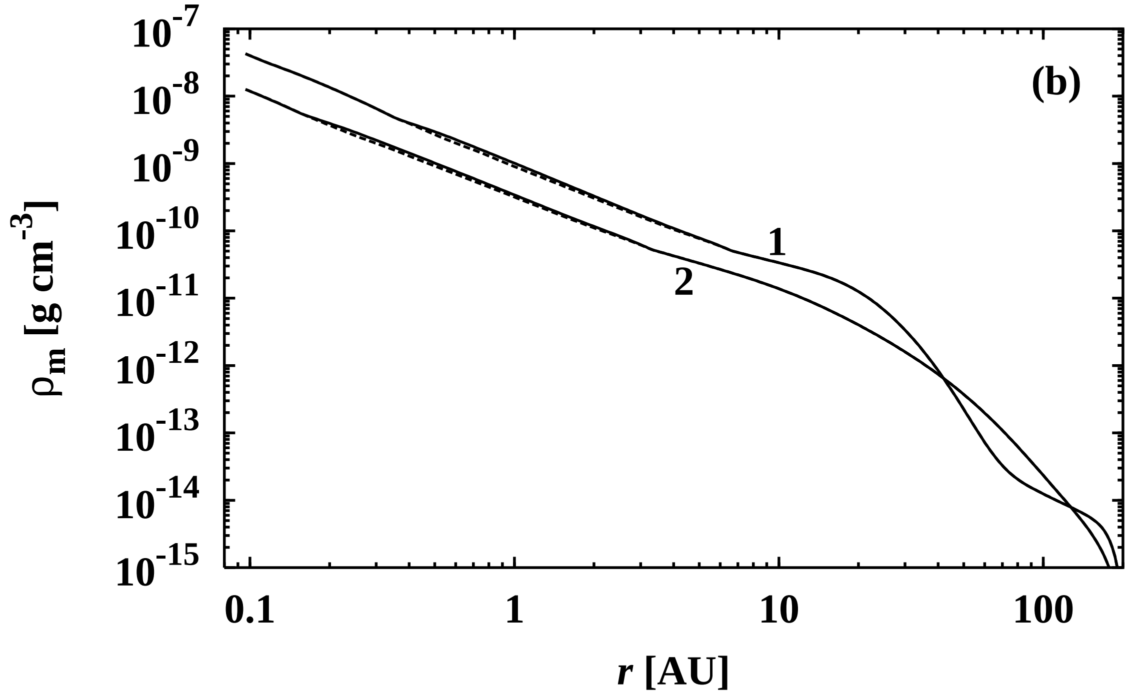


Abbildung 4.4.6: Struktur der Scheiben-Mittelebene in den Modellen 2DVT (durchgezogene Linien) und 2DST (gestrichelte Linie) nach $t = 0$ (0), 10^5 (1) und $6.5 \cdot 10^5$ a (2). **(a)** Zentral-Temperatur $T_z(z = 0)$. **(b)** Zentral-Dichte $\rho_z(z = 0)$. Das Anfangsmodell für die Dichte ist aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht abgebildet.

Dies läßt sich in Abb. 4.4.6(a) deutlich erkennen. Der Bereich, in dem die Differenz der Zentral-Temperatur zwischen den Modellen 2DST und 2DVT mehr als $50\,\mathrm{K}$ beträgt, erstreckt sich z.B. nach $10^5\,\mathrm{a}$ von 0.4 bis $2.3\,\mathrm{AU}$. Die maximale Temperaturdifferenz zwi-

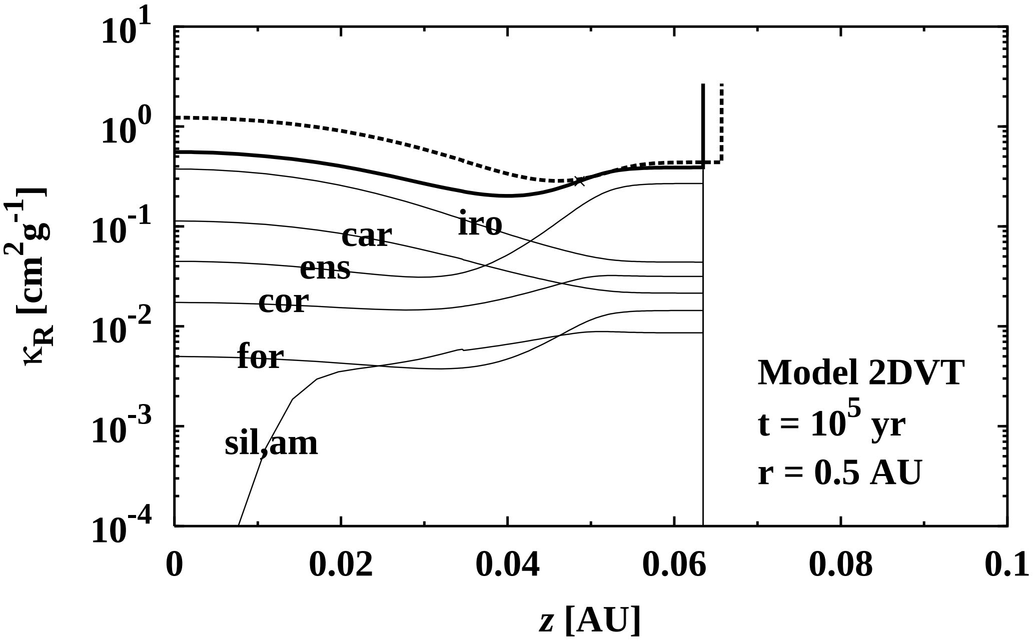


Abbildung 4.4.7: Vertikaler Verlauf des Rosselandmittels des Massenextinktionskoeffizienten $\kappa_{\rm R}$ der Scheibenmaterie insgesamt (dicke, durchgezogene Linie) und der individuellen Absorber (dünne, durchgezogene Linien) im Modell 2DVT bei $0.5\,\rm AU$ nach $10^5\,\rm a$. Aufgetragen ist ebenfalls $\kappa_{\rm R}$ im Modell 2DST nach $10^5\,\rm a$ (dicke, gestrichelte Linie). Die Höhe über der Mittelebene, bei der die Scheibe vertikal optisch dünn wird, ist mit einem Kreuz markiert. Die vertikalen Linien am rechtsseitigen Ende der Kurven sind ein Artefakt der oberen Randbedingung, wo $f_{\rm cry,for} = f_{\rm cry,ens} = 0$ und $f_{\rm car} = 0.6$ gesetzt wurde.

schen den Modellen zu diesem Zeitpunkt wird bei $0.55\,\rm AU$ erreicht und beträgt $226\,\rm K$. Nach $6.5 \cdot 10^5\,\rm a$ liegen ähnlich Verhältnisse vor, mit dem Unterschied, daß die Scheibenmaterie durch den Akkretionsprozeß einwärts transportiert wurde.

Die Zentral-Dichte (Abb. 4.4.6(b)) weicht zwischen den Modellen 2DST und 2DVT um maximal $\sim 15\,\%$ voneinder ab. Aufgrund der effizienteren Kühlung der Scheibe im Modell 2DVT ist diese etwas dichter als die Scheibe des Modells 2DST.

Vertikale Struktur Abschließend soll die vertikale Struktur der Scheibe mit und ohne meridionalem Geschwindigkeitsfeld diskutiert werden. Zu diesem Zweck zeigt Abb. 4.4.7 den vertikalen Verlauf des Rosselandmittels des Massenextinktionskoeffizienten $\kappa_{\rm R}$ bei $0.5\,\rm AU$ nach $10^5\,\rm a$. Die Opazitätsverläufe der individuellen Absorber sind ebenfalls in der Abbildung dargestellt.

Eisen und Silizium sind im Modell 2DVT bei $0.5\,\rm AU$ und nach $10^5\,\rm a$ vollständig in Eisenstaub bzw. den Silikaten kondensiert. Nahe der Mittelebene stellt metallisches Eisen den Hauptabsorber dar, während am oberen Rand des Rechengebietes hauptsächlich kristallines Enstatit zur Opazität beiträgt. Letzteres ist zunächst etwas überraschend, denn die Opazität der kristallinen Silikate liegt in der Scheiben-Mittelebene etwa eine Größenordnung unter der Opazität der Hauptabsorber (Eisen, amorphe Silikate, Kohlenstoffstaub). Die Erklärung hierfür ist, daß zum einen die Eisenopazität mit abnehmender Temperatur fällt (sowie die Enstatitopazität steigt) und damit die Opazität von Eisen am oberen Rand geringer wird als die Opazität von Enstatit. Zum anderen liegt nur ein geringer Anteil an amorphen, d.h. nicht-kristallisierten Silikaten vor. Am oberen Rand beträgt dieser Anteil $5.2 \cdot 10^{-3}$ des Gesamtsilikats, was zur Folge hat, daß das amorphe Silikat dort nur $2.6\,\%$ zur Gesamtopazität beiträgt.

In der Mittelebene sind die Silikate vollständig kristallisiert. Es ist bemerkenswert, daß am oberen Rand überhaupt ein geringer Anteil des Silikats in amorpher Form vorliegt. Dies ist darauf zurückzuführen, daß Silikat, welches weniger prozessiert ist, in die kühlen äußeren Schichten der Atmosphäre radial eingemischt wird und somit das stärker prozessierte Silikat verdünnt. Dagegen kristallisiert das Silikat nahe der warmen Mittelebene verglichen mit der Mischungszeitskala praktisch instantan. Das vertikale Mischen kann den Konzentrationsgradienten zwischen Mittelebene und oberem Rand zwar fast, aber nicht gänzlich ausgleichen. Dies erklärt die Anwesenheit von amorphem Silikat in den höheren Atmosphärenschichten im Modell bei $0.5\,\mathrm{AU}$ und nach $10^5\,\mathrm{a}$ (Abb. 4.4.7).

Kohlenstoff ist im Modell 2DVT bei $0.5\,\mathrm{AU}$ zum Zeitpunkt $t = 10^5\,\mathrm{a}$ in der Mittelebene zu $3.2\,\%$ und am oberen Rand zu $3.6\,\%$ in Ruß kondensiert. Die vertikale Diffusion sorgt, wie bereits früher gesehen, für einen nahezu vollständigen Ausgleich der vertikalen Gradienten in den Stoffkonzentrationen. Der geringe Kondensationsgrad von Kohlenstoff führt dennoch dazu, daß der Kohlenstoffstaub hier einen der wesentlichen Absorber darstellt ($\sim 20\,\%$ der Gesamtopazität nahe der Mittelebene). Korund trägt, obwohl Aluminium vollständig in Korund kondensiert ist, dagegen weniger als $8\,\%$ zur Gesamtopazität bei. Der Beitrag des kristallinen Forsterit zur Opazität ist hier geringer als $2\,\%$.

Der vertikale Opazitätsverlauf im Modell 2DVT zeigt im Vergleich zum Modell 2DST (gestrichelte Kurve in Abb. 4.4.7), wie das meridionale Strömungsfeld die Scheibenstruktur verändert. Das effiziente Auswärtsmischen von Tracern (kristalline Silikate, Produkte der Kohlenstoffverbrennung) beim meridionalen Strömungsfeld hat zur Folge, daß die Opazität in den mittleren Scheibenbereichen deutlich verringert wird. Im Modell 2DVT ist die Opazität in der Mittelebene bei $0.5\,\mathrm{AU}$ und nach $10^5\,\mathrm{a}$ gegenüber dem Modell 2DST auf weniger als die Hälfte reduziert. Die Zentral-Temperaturen der Modelle unterscheiden sich hier daher beträchtlich: $1\,180\,\mathrm{K}$ im Modell 2DST und $986\,\mathrm{K}$ im Modell 2DVT. Die vertikale Schichtung im Modell 2DST ist daher wärmer als im Modell 2DVT. Dies führt dazu, daß die Scheibe im Modell 2DST eine geringfügig größere vertikale Ausdehnung besitzt als die Scheibe im Modell 2DVT (Abb. 4.4.7).

Die vertikalen Opazitätsstrukturen des Modells 2DVT bei 0.1 und $1.5\,\mathrm{AU}$ nach $10^5\,\mathrm{a}$ gleichen in wesentlichen Gesichtspunkten den Opazitätsstrukturen, die in Abb. 3.5.3 für das Modell 1+1DBS gezeigt sind.

Fazit des Abschnitts Das wichtigste Ergebnis dieses Abschnitts ist, daß der advektive Stofftransport in der Scheibe die Scheibenstruktur wesentlich beeinflußt. Es erweist sich für eine realistische Scheibenmodellierung als essentiell, zu jedem Zeitpunkt das exakte Strömungsfeld der Scheibe zu bestimmen. Dieses ist nach derzeitigem Verständnis durch das meridionale Strömungsfeld gegeben.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

5.1 Ergebnisse der Dissertation

Ziel der Dissertation war es, das Ausmaß des radialen Stofftransports in protoplanetaren Akkretionsscheiben zu bestimmen. Zu diesem Zweck wurden numerische Modellrechnungen durchgeführt, in denen die Gleichungen der $1+1$-dimensionalen Scheibenstruktur erstmals simultan mit den 2-dimensionalen Transport-Reaktions-Gleichungen für unterschiedliche Tracer gelöst worden sind. Dabei wurde besonderer Wert auf eine realistische Beschreibung des 2-dimensionalen Strömungsfeldes in der Scheibe gelegt.

Die wichtigsten Ergebnisse der Dissertation lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Der Stofftransport in der Scheibe beeinflußt die Scheibenstruktur. Prozesse wie die Kristallisation der Silikate und die Verbrennung des Kohlenstoffstaubs sowie der Transport dieser Stoffe sollten in realistischen Scheibenmodellen nicht venachlässigt werden. Die Silikate und der Kohlenstoffstaub bestimmen als Hauptabsorber die Struktur der Scheibe maßgeblich mit.

- Der Stofftransport in der Scheibe ist wesentlich von der Scheibengeometrie abhängig. Reale Scheiben weiten sich nach außen hin auf. Daher ist die Wahl von Polar-Koordinaten oder konkaven Koordinaten für eine realistische Behandlung des Stofftransports der Wahl von Zylinder-Koordinaten vorzuziehen. Die Aufweitung der Scheibe bewirkt gegenüber einer flachen Geometrie, daß Stoffe in den äußeren Scheibenregionen beträchtlich verdünnt werden.

- Der Stofftransport in der Scheibe ist wesentlich vom 2-dimensionalen Charakter des Strömungsfeldes in der Scheibe abhängig. Das Strömungsfeld der Einzonennäherung erscheint wenig realistisch. Das reale Strömungsfeld in der Scheibe ist wahrscheinlich durch das meridionale Strömungsfeld gegeben. Die meridionale Flußstruktur bewirkt einen wesentlich effizienteren radialen Auswärtstransport von Stoffen als das Strömungsfeld der Einzonennäherung. Legt man das meridionale Strömungsfeld zugrunde, bietet der Stofftransport im solaren Nebel eine mögliche Erklärung für das kristalline Silikat sowie das Methan in den Kometen.

Darüber hinaus bietet der Stofftransport im solaren Nebel eine natürliche Erklärung dafür, daß die Kometen unterschiedliche Anteile an kristallinem Silikat aufweisen. Kometen mit geringem Anteil an kristallinem Silikat haben sich demnach im Außenbereich des solaren Nebels gebildet, wohin nur wenig kristallines Silikat durch radialen Transport hingelangen konnte. Kometen mit hohem Anteil an kristallinem Silikat dagegen sind weiter innen im solaren Nebel entstanden (jedoch noch jenseits der Eisfront). Der Anteil des kristallinen Silikats, bezogen auf das Gesamtsilikat, kann den Modellrechnungen zufolge jenseits der Eisfront über 20 % betragen. Dies entspricht dem, was aus den Spektren mancher Kometen abgeleitet wird.

Es sei einschränkend bemerkt, daß der Vergleich der Modellergebnisse mit Beobachtungsdaten des heutigen Sonnensystems die genaue Kenntnis der Anfangsbedingungen des solaren Nebels voraussetzt. Die Anfangsmasse und der anfängliche Drehimpuls der solaren Akkretionsscheibe sind jedoch keine exakt bekannten Größen. Deren Wahl im Modell beeinflußt den Stofftransport in der Akkretionsscheibe. Gleichfalls ist die Kenntnis der Ursache für die Turbulenz im solaren Nebel notwendig, um den diffusiven Transport von Stoffen wirklichkeitsgetreu modellieren zu können.

Trotz dieser Einschränkungen läßt sich schließen, daß der Stofftransport im turbulenten Strömungsfeld der protoplanetaren Akkretionsscheibe es grundsätzlich möglich macht, wichtige Aspekte der Zusammensetzung der ursprünglichsten Körper des Sonnensystems zu erklären.

5.2 Ausblick

Das in dieser Dissertation entwickelte Modell der protoplanetaren Akkretionsscheibe läßt sich noch weiter ausbauen und der Realität anpassen. Beim Ausbau des Modellprogramms könnten beispielsweise folgende Punkte berücksichtigt werden:

- Wachstum der Staubteilchen durch Koagulation
- Bestrahlung der Scheibenoberfläche durch den Stern und die damit verbundene Aufheizung der Scheibe
- vertikaler Wärmetransport durch Konvektion
- Behandlung der Turbulenz mittels eines Mischungsweganansatzes
- Masseneinfall auf die Scheibe in der Frühphase der Scheibenentwicklung
- eine differenzierte Kohlenwasserstoffchemie verbunden mit dem Transport der Kohlenwasserstoffe in der Scheibe (z.B. Methan)
- weitere Tracer, z.B. deuteriumhaltige Verbindungen, und deren Transport

Diese und weitere Aspekte sollen zukünftigen Untersuchungen vorbehalten sein.

Anhang A

Formeln

A.1 Freie Bildungs-Enthalpien der chemischen Verbindungen

Die freien Enthalpien für die Bildung der chemischen Verbindungen aus freien Atomen werden nach der Approximationsformel

$$\Delta G = AT^{-1} + B + CT + DT^2 + ET^3 \tag{A.1.1}$$

berechnet. Die Koeffizienten der Approximationsformel sind in Tab. A.1.1 für die unterschiedlichen in dieser Arbeit berücksichtigten Spezies aufgeführt (Daten aus Sharp & Huebner 1990). Einzige Ausnahme ist Wassereis, für das die Approximationsformel

$$\Delta G = R\,\ln 10\left(A\,T\log_{10}T + B + CT + DT^2 + ET^3 - \log\left(1.01325\cdot 10^5\right)\right) \tag{A.1.2}$$

mit den Koeffizienten aus Lichtenegger & Kömle (1991) verwendet wird.

Tabelle A.1.1: Koeffizienten zur Berechnung der Bildungs-Enthalpien der chemischen Verbindungen gemäß der Approximationsformel (A.1.2) für Wassereis (Daten aus Lichtenegger & Kömle 1991) und der Approximationsformel (A.1.1) für die übrigen Spezies (Daten aus Sharp & Huebner 1990). **Oben:** Moleküle. **Unten:** Kondensate.

Spezies	A	B	C	D	E
H_2	$4.25321\cdot 10^5$	$-1.07123\cdot 10^5$	$2.69980\cdot 10^1$	$5.48280\cdot 10^{-4}$	$-3.81498\cdot 10^{-8}$
CO	$3.30340\cdot 10^5$	$-2.59792\cdot 10^5$	$3.23662\cdot 10^1$	$3.33339\cdot 10^{-4}$	$-1.69521\cdot 10^{-8}$
H_2O	$8.66184\cdot 10^5$	$-2.27857\cdot 10^5$	$5.61473\cdot 10^1$	$7.62548\cdot 10^{-4}$	$-4.95254\cdot 10^{-8}$
OH	$4.15670\cdot 10^5$	$-1.05260\cdot 10^5$	$2.54985\cdot 10^1$	$4.78020\cdot 10^{-4}$	$-2.82416\cdot 10^{-8}$
SiO	$1.82780\cdot 10^5$	$-1.92839\cdot 10^5$	$3.03804\cdot 10^1$	$4.16079\cdot 10^{-4}$	$-1.91035\cdot 10^{-8}$
AlH	$8.52428\cdot 10^5$	$-7.28690\cdot 10^4$	$2.55046\cdot 10^1$	$2.68907\cdot 10^{-4}$	$-2.72109\cdot 10^{-8}$
Al_2O	$6.07281\cdot 10^4$	$-2.52793\cdot 10^5$	$5.85868\cdot 10^1$	$2.94808\cdot 10^{-5}$	$0.00000\cdot 10^0$
AlOH	$1.01901\cdot 10^6$	$-2.39925\cdot 10^5$	$6.15071\cdot 10^1$	$1.52650\cdot 10^{-4}$	$-1.37783\cdot 10^{-8}$
AlO_2H	$9.94834\cdot 10^5$	$-3.66363\cdot 10^5$	$9.09265\cdot 10^1$	$1.03148\cdot 10^{-4}$	$-8.91785\cdot 10^{-9}$
Mg_2SiO_4	$7.52334\cdot 10^4$	$-9.38369\cdot 10^5$	$2.47581\cdot 10^2$	$-3.14980\cdot 10^{-3}$	$0.00000\cdot 10^0$
$MgSiO_3$	$8.74400\cdot 10^3$	$-6.92565\cdot 10^5$	$1.77877\cdot 10^2$	$-1.41412\cdot 10^{-3}$	$0.00000\cdot 10^0$
Fe	$0.00000\cdot 10^0$	$-9.76386\cdot 10^4$	$3.55605\cdot 10^1$	$-1.12348\cdot 10^{-3}$	$0.00000\cdot 10^0$
Al_2O_3	$0.00000\cdot 10^0$	$-7.32976\cdot 10^5$	$1.84782\cdot 10^2$	$-2.57313\cdot 10^{-3}$	$0.00000\cdot 10^0$
H_2O	$8.23000\cdot 10^0$	$-2.44560\cdot 10^3$	$-4.63200\cdot 10^0$	$-1.67700\cdot 10^{-2}$	$1.20500\cdot 10^{-5}$

Die Zahlenwerte der Koeffizienten gelten für den Fall, daß für die Gaskonstante der Wert $R = 1.987165\,\mathrm{cal\,K^{-1}Mol^{-1}}$ verwendet und der Druck in Einheiten von Atmosphären ($1\,\mathrm{atm} = 1.01325{\cdot}10^5\,\mathrm{Pa}$) angegeben wird.

A.2 Approximationsformeln für die Opazität

Im Folgenden sind die Approximationsformeln für die Berechnung der Massenextinktionskoeffizienten der unterschiedlichen Spezies aufgeführt. [1]

A.2.1 Opazität der unterschiedlichen Staubsorten

Die Approximationsformeln für die Berechnung der Rosseland- und Planckmittel der im Modell berücksichtigten Staubsorten sind freundlicherweise von H.-P. Gail (persönliche Mitteilung) zur Verfügung gestellt worden. Die Bezugsquelle der optischen Konstanten, mit deren Hilfe die Extinktionskoeffizienten der unterschiedlichen Staubsorten mittels der Mie-Theorie (Mie 1908) berechnet wurden, ist jeweils angegeben. Es wurde für die Staubteilchen eine MRN-Größenverteilung (Glg. 2.4.3) angenommen.

Korund Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von Korund wird berechnet mittels

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{R,cor}} = \Bigg[& \frac{1}{(3.662{\cdot}10^{-7}\,T^{2.122})^4} \\ & + \frac{1}{(1.753{\cdot}10^{1}\,T^{-1.128})^4 + (1.203{\cdot}10^{-4}\,T^{0.719})^4 + (1.069{\cdot}10^{-9}\,T^{2.256})^4}\Bigg]^{-1/4}\end{aligned} \tag{A.2.1}$$

$$\begin{aligned}\kappa_{\mathrm{P,cor}} = \Bigg[& \left(\frac{1}{2.782{\cdot}10^{-7}\,T^{2.518}} + \frac{1}{1.446{\cdot}10^{3}\,T^{-1.530}}\right)^{-2} \\ & + \left(\frac{1}{1.234{\cdot}10^{1}\,T^{2.351}} + \frac{1}{3.88{\cdot}10^{-8}\,T^{1.817}}\right)^{-2}\Bigg]^{1/2} .\end{aligned} \tag{A.2.2}$$

Die optischen Konstanten stammen von Koike et al. (1995). Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $10\,\mathrm{K} \leq T \leq 5\,000\,\mathrm{K}$ mit einer Genauigkeit von einigen Prozent.

Forsterit Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von kristallinem Forsterit wird mangels Daten mit Hilfe der optischen Konstanten von kristallinem Olivin von Huffman

[1] Der Berechnung der Massenextinktionskoeffizienten liegen die Elementhäufigkeiten von Anders & Grevesse (1989) zugrunde. Für ϵ_{C} und ϵ_{O} werden jedoch die neueren Werte nach Allende Prieto et al. (2002) verwendet (siehe Abschnitt 2.3.1). Daher sind die Opazitäten aller Spezies, deren Schlüsselelemente C oder O sind, mit einem Faktor $\epsilon_{\mathrm{C,AP}}/\epsilon_{\mathrm{C,AG}}$ bzw. $\epsilon_{\mathrm{O,AP}}/\epsilon_{\mathrm{O,AG}}$ zu multiplizieren, wobei die Werte nach Anders & Grevesse (1989) mit ‚AG' und die Werte nach Allende Prieto et al. (2002) mit ‚AP' gekennzeichnet sind.

(private Mitteilung) berechnet:

$$\kappa_{\mathrm{R,for,cry}} = \left[\frac{1}{(6.147{\cdot}10^{-7}\,T^{2.444})^2} + \frac{1}{(6.957{\cdot}10^{4}\,T^{-2.329})^2 + \sqrt{(3.505{\cdot}10^{-4}\,T^{0.755})^4 + (1.043{\cdot}10^{-9}\,T^{2.523})^4}}\right]^{-1/2} \tag{A.2.3}$$

$$\kappa_{\mathrm{P,for,cry}} = \left[\frac{1}{1.0{\cdot}10^{-10}\,T^{5.367}} + \frac{1}{8.282{\cdot}10^{-3}\,T^{1.233}} + \frac{1}{1.446{\cdot}10^{6}\,T^{-2.081} + 9.364{\cdot}10^{-22}\,T^{5.6}}\right]^{-1} . \tag{A.2.4}$$

Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $100\,\mathrm{K} \leq T \leq 5\,000\,\mathrm{K}$.

Enstatit Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von kristallinem Enstatit wird mangels Daten mit Hilfe der optischen Konstanten von kristallinem Pyroxen berechnet, welche der Datensammlung des Astrophysikalischen Instituts der Universität Jena[2] entnommen wurden:

$$\kappa_{\mathrm{R,ens,cry}} = \left[\frac{1}{(1.2684{\cdot}10^{-5}\,T^{2.0434})^2} + \frac{1}{(1.5{\cdot}10^{6}\,T^{-2.8355})^2 + (7.1881{\cdot}10^{-5}\,T^{0.9254})^2 + (3.6364{\cdot}10^{-10}\,T^{2.6043})^2}\right]^{-1/2} \tag{A.2.5}$$

$$\kappa_{\mathrm{P,ens,cry}} = \left[\frac{1}{(1.0987{\cdot}10^{-5}\,T^{2.3814} + 5.4041{\cdot}10^{-9}\,T^{4.2242})^{1/4}} + \frac{1}{(3.1881{\cdot}10^{7}\,T^{-2.5309})^{1/4}}\right]^{-4} . \tag{A.2.6}$$

Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $20\,\mathrm{K} \leq T \leq 3\,000\,\mathrm{K}$.

Amorphes Silikat Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von amorphem Silikat wird mit Hilfe der optischen Konstanten des ISM-Silikatstaubs nach Draine (1985) berechnet:

$$\kappa_{\mathrm{R,sil,am}} = \left[\frac{1}{(6.724{\cdot}10^{-5}\,T^{1.951})^4} + \frac{1}{(1.268{\cdot}10^{2}\,T^{-0.710})^4 + (7.669{\cdot}10^{-4}\,T^{1.094})^4 + (1.772{\cdot}10^{-6}\,T^{1.882})^4}\right]^{-1/4} \tag{A.2.7}$$

[2] Siehe: `http://www.astro.uni-jena.de`

$$\kappa_{\mathrm{P,sil,am}} = \left[\frac{1}{((2.290{\cdot}10^{-12}\,T^{5.207})^4 + (1.296{\cdot}10^{-4}\,T^{2.018})^4)^{1/4}} + \frac{1}{1.621{\cdot}10^{3}\,T^{-0.986} + 7.616{\cdot}10^{-6}\,T^{1.615}} \right]^{-1} . \quad \text{(A.2.8)}$$

Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $10\,\mathrm{K} \leq T \leq 6\,000\,\mathrm{K}$.

Eisen Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von metallischem Eisen wird berechnet mittels

$$\kappa_{\mathrm{R,iro}} = \left[\frac{1}{(3.341{\cdot}10^{-5}\,T^{1.632})^4} + \frac{1}{(6.405{\cdot}10^{-4}\,T^{0.777})^4 + (4.385{\cdot}10^{-7}\,T^{1.981})^4} \right]^{-1/4} \quad \text{(A.2.9)}$$

$$\kappa_{\mathrm{P,iro}} = \left[\left(\frac{1}{(1.688{\cdot}10^{-5}\,T^{2.221})^2} + \frac{1}{(9.393{\cdot}10^{-4}\,T^{0.6759})^2} \right)^{-1} + \left(\frac{1}{(2.442{\cdot}10^{-7}\,T^{2.142})^2} + \frac{1}{(1.888{\cdot}10^{-2}\,T^{0.7156})^2} \right)^{-1} \right]^{1/2} . \quad \text{(A.2.10)}$$

Die optischen Konstanten stammen für den Wellenlängenbereich $\lambda \leq 12.4\,\mu\mathrm{m}$ von Lide (1995) und für größere Wellenlängen von Pollack et al. (1994). Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $10\,\mathrm{K} \leq T \leq 30\,000\,\mathrm{K}$.

Kohlenstoff Das Rosseland- bzw. Planckmittel der Opazität von Ruß wird mit Hilfe der optischen Konstanten des ISM-Kohlenstoffstaubs nach Draine (1985) berechnet:

$$\kappa_{\mathrm{R,car}} = \left[\frac{1}{(1.692{\cdot}10^{-4}\,T^{1.813})^4} + \frac{1}{(3.167{\cdot}10^{-2}\,T^{0.612})^4 + (2.938{\cdot}10^{-5}\,T^{1.750})^4} \right]^{-1/4} \quad \text{(A.2.11)}$$

$$\kappa_{\mathrm{P,car}} = \left[\left(\frac{1}{(2.648{\cdot}10^{-4}\,T^{1.879})^2} + \frac{1}{(1.621{\cdot}10^{-1}\,T^{0.294})^2} \right)^{-1} + \left(\frac{1}{(7.201{\cdot}10^{-6}\,T^{2.025})^2} + \frac{1}{(1.204{\cdot}10^{-2}\,T^{1.035})^2} \right)^{-1} \right]^{1/2} . \quad \text{(A.2.12)}$$

Die Approximationsformeln gelten für den Temperaturbereich $10\,\mathrm{K} \leq T \leq 5\,000\,\mathrm{K}$.

Eis Für das Rosselandmittel der Opazität von Wassereis wird die Approximationsformel von Lin & Papaloizou (1985) verwendet:

$$\kappa_{\mathrm{R,ice}} = 2.0{\cdot}10^{-4}\,T^2 . \quad \text{(A.2.13)}$$

Das Planckmittel der Opazität von Wassereis wird nach Nakamoto & Nakagawa (1994) approximiert:

$$\kappa_{\mathrm{P,ice}} = 4.78{\cdot}10^{-4}\,T^2 . \quad \text{(A.2.14)}$$

A.2.2 Opazität der Moleküle

Für den Massenextinktionskoeffizienten der Moleküle wird die Approximationsformel von Keeley (1970) mit der Korrektur von Marigo (2002) verwendet:

$$\kappa_{\mathrm{mol}} = \frac{n_{\mathrm{H}} + n_{\mathrm{H_2}}}{\rho} \left(\frac{5.55 \cdot 10^{-27}\, T^4}{1 + 10\, T^6 + 3.42 \cdot 10^{-5}\, T^{-6}} \right) + \frac{n_{\mathrm{CO}}}{\rho} \left(2.75 \cdot 10^{-26} \right) +$$
$$\frac{n_{\mathrm{OH}}}{\rho} \left(\frac{1.4 \cdot 10^{-21}\, T^6}{0.1 + T^6} \right) + \frac{n_{\mathrm{H_2O}}}{\rho} \left(\frac{2.6 \cdot 10^{-27}}{4.23 \cdot 10^{-4} + T^4} + \frac{9.72 \cdot 10^{-21}\, e^{-3.2553/(T^4 + 0.37)}}{1 + 3.78 \cdot 10^3\, T^{10}} \right) . \quad \text{(A.2.15)}$$

Hier ist T die Temperatur, ρ die Dichte, und n_{Y} bezeichnet die Teilchendichte der Spezies Y. Die Teilchendichte einer Spezies läßt sich aus dem Partialdruck derselben Spezies durch

$$n_{\mathrm{Y}} = \frac{p_{\mathrm{Y}}}{k_{\mathrm{B}} T} \quad \text{(A.2.16)}$$

berechnen. Im Rahmen des Modells wird der Ausdruck (A.2.15) gleichermaßen für das Rosseland- wie für das Planckmittel verwendet.

In der ursprünglichen Form der Approximationsformel von Keeley treten auch Terme für Absorptionsprozesse bei höheren Temperturen ($T \gtrsim 4\,000\,\mathrm{K}$) auf. Diese Terme wurden in Glg. (A.2.15) vernachlässigt.

A.3 Fehlerfunktion

Die Fehlerfunktion ist definiert durch

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2}\, dt \; . \quad \text{(A.3.1)}$$

Nach Abramowitz & Stegun (1964) läßt sich die Fehlerfunktion durch den Ausdruck

$$\Phi(x) = 1 - \left(a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + a_4 t^4 + a_5 t^5 \right) e^{-x^2} + \epsilon(x) \quad \text{(A.3.2)}$$

mit

$$t = \frac{1}{1 + px}$$

bis auf eine Genauigkeit von $\epsilon(x) \leq 1.5 \cdot 10^{-7}$ approximieren. Die einzelnen Faktoren der Approximation sind gegeben durch

$$p = 0.3275911 \qquad a_1 = 0.254829592 \qquad a_2 = -0.284496736$$
$$a_3 = 1.421413741 \qquad a_4 = -1.453152027 \qquad a_5 = 1.061405429 \; .$$

Anhang B

Numerische Methoden

B.1 Quasistationäre Randbedingung

In diesem Abschnitt wird die numerische Behandlung der quasistationären Randbedingung am Innenrand der protoplanetaren Scheibe im Modell beschrieben. Für die Behandlung der quasistationären Randbedingung siehe ebenfalls Wehrstedt & Gail (2003).

Frühere Berechnungen von zeitabhängigen Scheibenmodellen in der Einzonennäherung (z.B. Lin & Papaloizou 1985; Ruden & Lin 1986; Ruden & Pollack 1991; Bell & Lin 1994) zeigen, daß die innerste Region der Scheibe sich schnell, d.h. innerhalb der dort relativ kurzen viskosen Zeitskala (Glg. (2.2.12)), in einen quasistationären Zustand entwickelt. Die Massenakkretionsrate $\dot{M}$ ist dann in diesem Bereich nahezu radial konstant. Es erscheint daher vernünftig, die zeitabhängige Berechnung der äußeren Scheibe mit einer stationären Berechnung der Scheibenstruktur am Innenrand zu verknüpfen.

Zu diesem Zweck wird die Massenakkretionsrate des zeitabhängigen Modells am Innenrand in folgender diskretisierter Form dargestellt (vergl. Glgen. (2.2.4) und (2.2.5)):

$$\dot{M}_1 = -\frac{3\pi}{\sqrt{r_2}-\sqrt{r_1}} \left(\nu_2 \Sigma_2 \sqrt{r_2} - \nu_1 \Sigma_1 \sqrt{r_1}\right) \ . \tag{B.1.1}$$

Die Indices ‚1' und ‚2' stehen für Größen am Innenrand bzw. am zweiten radialen Gitterpunkt. ν_2 und Σ_2 werden aus der Lösung der Gleichungen des zeitabhängigen Modells für die äußere Scheibe bestimmt. ν_1 und Σ_1 dagegen sind zunächst unbekannt. Sie werden durch die Lösung der Gleichungen der radialen Scheibenstruktur bei $k = 1$ im *stationären* Fall berechnet. Das Gleichungssystem für die radiale Struktur der Scheibe ist gegeben durch Glgen. (2.6.2) – (2.6.15), Glg. (B.1.1) sowie

$$\Sigma_1 = \frac{|\dot{M}_1|}{3\pi\nu_1} \left(1 - \sqrt{\frac{R_*}{r_1}}\right) \ , \tag{B.1.2}$$

welche die zeitabhängige Glg. (2.6.1) ersetzt. Das Gleichungssystem kann für gegebenes ν_2 und Σ_2 gelöst werden.

Nach Glgen. (B.1.1) und (B.1.2) ist Σ_1 nun eine Funktion von ν_2 und Σ_2. Da ν_2 selbst eine Funktion von Σ_2 ist, erhält man grundsätzlich

$$\Sigma_1 = \Psi(\Sigma_2) \ , \tag{B.1.3}$$

wobei die Funktion Ψ durch die Lösung des nicht-linearen Systems von Gleichungen (B.1.1), (2.6.2) – (2.6.15) und (B.1.2) zu bestimmen ist.
Die Verknüpfung des zeitabhängigen Modells der äußeren Scheibe mit dem stationären Modell am Innenrand sieht folgendermaßen aus: Sei m der momentane Iterationsschritt der globalen Iteration für die Flächendichte im Einzonenmodell (siehe Abb. 2.7.1). Die Lösung für Σ_1 innerhalb der globalen Iteration ist gegeben durch

$$\Sigma_1^{(m)} + \delta\Sigma_1 \;=\; \Psi(\Sigma_2^{(m)} + \delta\Sigma_2) \;\approx\; \Psi(\Sigma_2^{(m)}) + \left.\frac{\partial\Psi}{\partial\Sigma_2}\right|_{\Sigma_2^{(m)}} \delta\Sigma_2 \;, \tag{B.1.4}$$

wobei die Taylor-Entwicklung nach dem linearen Term abgebrochen wurde. $\delta\Sigma_1$ und $\delta\Sigma_2$ sind die Korrekturen von $\Sigma_1^{(m)}$ bzw. $\Sigma_2^{(m)}$ im m-ten Schritt der globalen Iteration. Nach Glg. (B.1.4) ist die Korrektur $\delta\Sigma_1$ also näherungsweise durch

$$\delta\Sigma_1 \approx \left.\frac{\partial\Psi}{\partial\Sigma_2}\right|_{\Sigma_2^{(m)}} \delta\Sigma_2 \tag{B.1.5}$$

gegeben. Die Substitution der partiellen Ableitung in Glg. (B.1.5) durch einen Differenzenquotienten liefert schließlich

$$\delta\Sigma_1 \approx \frac{\Psi(\Sigma_2) - \Psi(\Sigma_2')}{\Sigma_2 - \Sigma_2'}\, \delta\Sigma_2 \;, \tag{B.1.6}$$

wobei im Modell $\Sigma_2' = (1 - 10^{-6})\Sigma_2$ gewählt wurde.
Die Werte von $\Sigma_2^{(m)}$ bzw. $\delta\Sigma_2$ erhält man mittels der Lösung des Gleichungssystems für den radialen Scheibenaufbau des zeitabhängigen Modells, wie in Abschnitt 2.7.4 und Anhang B.2 beschrieben. Um gemäß Glg. (B.1.6) den Wert von $\delta\Sigma_1$ zu bestimmen, muß das Gleichungssystems für das *stationäre* Modell am Innenrand zweimal gelöst werden (für Σ_2 und Σ_2'). Dies geschieht mit Hilfe eines Newton-Raphson-Verfahrens bis zu einer Genauigkeit von $2{\cdot}10^{-5}$. Durch Glg. (B.1.6) ist die Korrektur $\delta\Sigma_1$ von Σ_1 bestimmt. Auf diese Weise wird die innere Randbedingung innerhalb jedes Zeitschrittes des zeitabhängigen äußeren Scheibenmodells neu festgelegt.
Die quasistationäre Randbedingung vermeidet den unphysikalischen Abfall der Flächendichte und anderer relevanter Größen (Temperatur, Dichte etc.) am Innenrand, welcher bei Anwendung der no torque-Randbedingung ($\Sigma_1 = 0$) auftritt. Ein weiterer Vorteil der quasistationäre Innenrandbedingung ist, daß die Lage des Innenrands r_1 in Scheibenmodellen frei gewählt werden kann, ohne unphysikalische Abweichungen von der realen Scheibenstruktur in Kauf nehmen zu müssen. Es muß diesbezüglich nur gewährleistet sein, daß die Scheibe innerhalb von r_1 quasistationär, d.h. die Massenakkretionsrate näherungsweise radial konstant ist.

B.2 Lösung der Differentialgleichung für die Flächendichte

Es wird im Folgenden das numerische Lösungverfahren der parabolischen Differentialgleichung für die zeitliche Entwicklung der Flächendichte Σ,

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t} = \frac{3}{r}\frac{\partial}{\partial r}\sqrt{r}\frac{\partial}{\partial r}\nu\Sigma\sqrt{r} \;, \tag{B.2.1}$$

beschrieben.

Substitution Zunächst wird die Flächendichte-Gleichung (B.2.1) mittels zwei neuer Variablen

$$x = 2\sqrt{r} \,, \qquad S = x \cdot \Sigma \tag{B.2.2}$$

dargestellt. Mit diesen Variablen nimmt Glg. (B.2.1) die Form

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{12}{x^2} \frac{\partial^2 \nu S}{\partial x^2} \tag{B.2.3}$$

an. Gleichung (B.2.3) besitzt im Vergleich zu Gleichung (B.2.1) eine für die numerische Lösung zweckmäßigere Form.

Diskretisierung Als nächster Schritt wird die Differentialgleichung (B.2.3) diskretisiert. Um eine hinreichende Genauigkeit der Lösung zu gewährleisten, erfolgt die Diskretisierung der Gleichung (B.2.3) mit einer Genauigkeit von 2. Ordnung im Ort. Man erhält

$$\begin{aligned} \frac{S_k^{n+1} - S_k^n}{\Delta t} &= \Theta \frac{12}{x_k^2} \left[d_{\mathrm{l}k} (\nu S)_{k-1}^n + d_{\mathrm{m}k} (\nu S)_k^n + d_{\mathrm{r}k} (\nu S)_{k+1}^n \right] \\ &+ (1-\Theta) \frac{12}{x_k^2} \left[d_{\mathrm{l}k} (\nu S)_{k-1}^{n+1} + d_{\mathrm{m}k} (\nu S)_k^{n+1} + d_{\mathrm{r}k} (\nu S)_{k+1}^{n+1} \right] \,. \end{aligned} \tag{B.2.4}$$

mit den Koeffizienten

$$d_{\mathrm{l}k} = \frac{2}{h_\mathrm{l}(h_\mathrm{l} + h_\mathrm{r})} \qquad d_{\mathrm{m}k} = -\frac{2}{h_\mathrm{l} h_\mathrm{r}} \qquad d_{\mathrm{r}k} = \frac{2}{h_\mathrm{r}(h_\mathrm{l} + h_\mathrm{r})} \,,$$

$$h_\mathrm{l} = x_k - x_{k-1} \qquad h_\mathrm{r} = x_{k+1} - x_k \,.$$

Dies stellt ein gekoppeltes System von $K - 2$ Gleichungen dar, das die Werte von S_k^{n+1} an den Gitterpunkten $k = 2 \ldots (K-1)$ bestimmt. Die Werte von S_1^{n+1} und S_K^{n+1} sind durch die Randbedingungen festgelegt (siehe Abschnitt 2.7.3 sowie Anhang B.1).

Der Parameter Θ in Glg. (B.2.4) gibt an, zu welchem Anteil die Lösung explizit bzw. implizit erfolgt. Im Falle von $\Theta = 1$ heißt das Verfahren *explizit*, d.h. zur Bestimmung der S_k^{n+1} ist lediglich die Kenntnis der Größen des Zeitpunkts t^n nötig. Im Falle von $\Theta = 0$ heißt das Verfahren *voll implizit*, d.h. zur Bestimmung der S_k^{n+1} ist die Kenntnis der Größen des Zeitpunkts t^{n+1} vonnöten, d.h. auch die S_k^{n+1} selbst. Verfahren mit $0 < \Theta < 1$ heißen *implizit*.

Der Vorteil des expliziten Verfahrens gegenüber dem impliziten ist der geringere Rechenaufwand (innerhalb eines Zeitschritts), da die Größen des Zeitpunkts t^n bereits vom vorhergehenden Zeitschritts *explizit* bekannt sind. Beim impliziten Verfahren sind die Größen zum Zeitpunkt t^{n+1} zunächst unbekannt und müssen erst selbstkonsistent mit den S_k^{n+1} berechnet werden.

Der Nachteil des expliziten Verfahrens gegenüber dem impliziten ist jedoch die Existenz einer oberen Schranke $\Delta t_{\max}$ für die Zeitschrittweite beim expliziten Verfahren. Nur für Zeitschrittweiten $\Delta t \leq \Delta t_{\max}$ ist das explizite Verfahren numerisch stabil (Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) Bedingung; siehe z.B. Press et al. 1992). Demgegenüber läßt das voll implizite Verfahren im Prinzip die Wahl einer unbegrenzt großen Zeitschrittweite zu.

Lösungsmethode Im Modell wird das System von Gleichungen (B.2.4) mit Hilfe eines voll impliziten Verfahrens gelöst, d.h. $\Theta = 0$ gesetzt. Damit folgt aus Glg. (B.2.4)

$$R_k = S_k^{n+1} - S_k^n - \Delta t \frac{12}{x_k^2} \left[d_{lk} (\nu S)_{k-1}^{n+1} + d_{mk} (\nu S)_k^{n+1} + d_{rk} (\nu S)_{k+1}^{n+1} \right] \ . \tag{B.2.5}$$

In Glg. (B.2.5) wurde berücksichtigt, daß bei Vorgabe von Schätzwerten für die S_k^{n+1} das System von Gleichungen (B.2.5) i. A. noch nicht gelöst ist, d.h. ein Rest R_k verbleibt. Sei nun durch

$$\mathfrak{S}_k^{n+1} = S_k^{n+1} + \delta S_k^{n+1} \tag{B.2.6}$$

die exakte Lösung von Glg. (B.2.5) gegeben ($R_k = 0$), wobei die Größen δS_k^{n+1} die zunächst unbekannten Korrekturen für die S_k^{n+1} darstellen. Nun ist zu beachten, daß die Viskosität ν im Scheibenmodell selbst eine Funktion der Größe S ist. Mittels einer Taylorentwicklung erhält man in 1. Ordnung

$$\nu(\mathfrak{S}_k^{n+1}) = \nu(S_k^{n+1}) + \left(\frac{\partial \nu}{\partial S} \right)_k^{n+1} \delta S_k^{n+1} \ . \tag{B.2.7}$$

Die partielle Ableitung $\frac{\partial \nu}{\partial S}$ läßt sich als Differenzenquotient

$$\left(\frac{\partial \nu}{\partial S} \right)_k^{n+1} = \frac{\tilde{\nu}_k^{n+1} - \nu_k^{n+1}}{\tilde{S}_k^{n+1} - S_k^{n+1}} \tag{B.2.8}$$

ausdrücken. Dieser kann berechnet werden, indem der Algorithmus für die Lösung der radialen Aufbaugleichungen (2.6.2) – (2.6.15) zweimal durchlaufen wird, einmal bei Vorgabe des Wertes von S_k^{n+1} und ein zweites Mal bei Vorgabe des Wertes

$$\tilde{S}_k^{n+1} = S_k^{n+1} (1 + \eta) \tag{B.2.9}$$

für S_k^{n+1}, wobei im Modell $\eta = 6{\cdot}10^{-4}$ gesetzt ist.
Durch Glg. (B.2.8) ist ν am Gitterpunkt k als Funktion der Korrektur δS_k^{n+1} dargestellt. Unter dieser Voraussetzung läßt sich das Gleichungssystem (B.2.5) umformulieren und in den Korrekturen δS_k^{n+1} darstellen. Das Ergebnis dieser Prozedur liefert

$$X_k \, \delta S_{k-1}^{n+1} + Y_k \, \delta S_k^{n+1} + Z_k \, \delta S_{k+1}^{n+1} = -R_k \tag{B.2.10}$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned}
X_k &= \quad - \Delta t \frac{12}{x_k^2} d_{lk} \left[\nu_{k-1}^{n+1} + \left(S \frac{\partial \nu}{\partial S} \right)_{k-1}^{n+1} \right] \\
Y_k &= 1 - \Delta t \frac{12}{x_k^2} d_{mk} \left[\nu_k^{n+1} + \left(S \frac{\partial \nu}{\partial S} \right)_k^{n+1} \right] \\
Z_k &= \quad - \Delta t \frac{12}{x_k^2} d_{rk} \left[\nu_{k+1}^{n+1} + \left(S \frac{\partial \nu}{\partial S} \right)_{k+1}^{n+1} \right] \ .
\end{aligned} \tag{B.2.11}$$

Der Restterm R_k ist durch Glg. (B.2.5) gegeben.

Gleichung (B.2.10) stellt ein tridiagonales Gleichungssystem dar. In Matrix-Schreibweise bilden die Werte von Y_k die Hauptdiagonale und die Werte von X_k bzw. Z_k die beiden Nebendiagonalen einer Matrix mit tridiagonaler Gestalt. Die Lösung des Gleichungssystems (B.2.10) erfolgt mit der Rekursionsmethode, die in Press et al. (1992) beschrieben ist. Auf diese Weise werden die Korrekturen δS_k^{n+1} für alle $k = 2 \ldots (K-1)$ bestimmt. Die Werte von δS_1^{n+1} bzw. δS_K^{n+1} sind durch die Randbedingungen festgelegt (siehe Abschnitt 2.7.3 bzw. Anhang B.1).

Globale Iteration Mit den Werten der δS_k^{n+1} werden die Größen S_k^{n+1} bzw. die Flächendichte Σ_k^{n+1} an jeder radialer Stützstelle r_k bestimmt. Damit ist jedoch noch nicht die globale Lösung von $\Sigma(r)$ innerhalb eines Zeitschritts gefunden. Dies liegt daran, daß der Stofftransport über die Opazität auf die Scheibenstruktur, d.h. auf $\Sigma(r)$, zurückwirkt. Die globale Lösung wird durch eine Fixpunkt-Iteration von Σ gewonnen. Auf diese Weise wird die radiale Scheibenstruktur im Rahmen des Einzonenmodells selbstkonsistent mit dem radialen Stofftransport berechnet (vergl. Abb. 2.7.1).

Zeitschritt-Steuerung Obwohl ein voll implizites Verfahren zur Lösung der Flächendichte-Gleichung (B.2.1) verwendet wird, wird die Zeitschrittweite Δt nach oben begrenzt. Dieses Vorgehen ist infolge der Kopplung zwischen Σ und ν in der Flächendichte-Gleichung notwendig. Diese Kopplung läßt das numerische Verfahren bei der Wahl von sehr großen Zeitschrittweiten numerisch instabil werden. Eine begrenzte Zeitschrittweite gewährleistet die numerische Stabilität. Für die Wahl der maximalen Zeitschrittweite sowie für die Steuerung der Zeitschrittweite im Modell sei auf Abschnitt 2.7.4 verwiesen.

Genauigkeit der Diskretisierung Die Diskretisierung der Flächendichte-Gleichung (B.2.1) in der Form (B.2.4) ist, wie bereits erwähnt, von 2. Ordnung im Ort genau.[1]

Die Genauigkeit der Diskretisierung (B.2.4) ist 1. Ordnung in der Zeit. Die Flächendichte Σ verändert sich in der viskosen Zeitskala τ_{vis} (Glg. (2.2.12)). Da die maximale Zeitschrittweite im Modell immer bedeutend kleiner als das lokale τ_{vis} ist (vergl. Abb. 2.2.1), bewirkt die Diskretisierung (B.2.4) eine Abweichung von der tatsächlichen, zeitabhängigen Lösung, die vernachlässigbar ist.

B.3 Lösung des Systems von Transport-Reaktions-Gleichungen

Der Transport von Tracern in der protoplanetaren Scheibe wird im Rahmen des radialen Modells mittels eines Systems von Transport-Reaktions-Gleichungen

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} = \frac{1}{rn} \frac{\partial}{\partial r} rnD \frac{\partial c_{i,j}}{\partial r} + \frac{R_{i,j}}{n} \ . \tag{B.3.1}$$

beschrieben (vergl. Glg. (2.6.17)). Die im Modell berücksichtigten Tracer j sind

[1] Bei Verwendung eines äquidistanten Gitters ist die Diskretisierung (B.2.1) sogar von 3. Ordnung im Ort genau. Im Modell ist das radiale Gitter allerdings logarithmisch äquidistant.

- Forsterit- und Enstatit-Staubteilchen ($j \equiv$ ‚for' bzw. $j \equiv$ ‚ens') mit unterschiedlichem Kristallisationsgrad x_i, $i = 1 \ldots I_{\rm sil}$.
- Kohlenstoff-Staubteilchen ($j \equiv$ ‚car') mit unterschiedlichem Radius a_i, $i = 1 \ldots I_{\rm car}$.

Diskretisierung Die Transport-Reaktions-Gleichungen (Glg. (B.3.1)) werden in Ort und Zeit in der Form

$$\frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k}^{n}}{\Delta t} + A_{i,j,k}^{n+1} = \frac{1}{r_k n_k^{n+1}} \frac{(rnD)_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{c_{i,j,k+1}^{n+1} - c_{i,j,k}^{n+1}}{r_{k+1} - r_k} - (rnD)_{k-\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k-1}^{n+1}}{r_k - r_{k-1}}}{\frac{1}{2}\left(r_{k+1} - r_{k-1}\right)} + \frac{R_{i,j,k}^{n+1}}{n_k^{n+1}} \tag{B.3.2}$$

diskretisiert. Dabei bezeichnet

$$A_{i,j,k}^{n+1} = \begin{cases} v_{r,k}^{n+1} \dfrac{c_{i,j,k+1}^{n+1} - c_{i,j,k}^{n+1}}{r_{k+1} - r_{k-1}} & : \quad v_{r,k}^{n+1} \leq 0 \\[2ex] v_{r,k}^{n+1} \dfrac{c_{i,j,k}^{n+1} - c_{i,j,k-1}^{n+1}}{r_k - r_{k-1}} & : \quad v_{r,k}^{n+1} > 0 \end{cases} \tag{B.3.3}$$

den Advektionsterm,

$$\frac{R_{i,j,k}^{n+1}}{n_k^{n+1}} = \begin{cases} \frac{c_{i,j,k}^{n+1}}{\tau_{i,j,k}^{n+1}} & : \quad i = 1 \\[1ex] \frac{c_{i-1,j,k}^{n+1}}{\tau_{i-1,j,k}^{n+1}} - \frac{c_{i,j,k}^{n+1}}{\tau_{i,j,k}^{n+1}} & : \quad 2 \leq i \leq (I_j - 1) \\[1ex] \frac{c_{i-1,j,k}^{n+1}}{\tau_{i-1,j,k}^{n+1}} & : \quad i = I_j \end{cases} \tag{B.3.4}$$

den Ratenterm, und es gilt

$$(rnD)_{k-\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(r_k n_k^{n+1} D_k^{n+1} + r_{k-1} n_{k-1}^{n+1} D_{k-1}^{n+1}\right)$$

$$(rnD)_{k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{1}{2}\left(r_{k+1} n_{k+1}^{n+1} D_{k+1}^{n+1} + r_k n_k^{n+1} D_k^{n+1}\right) \ .$$

Die charakteristischen Zeitskalen der Reaktionen für die im Modell berücksichtigten Tracer sind gegeben durch (vergl. Glgen. (2.5.21) und (2.5.23))

$$\tau_{i,{\rm for},k}^{n+1} = \frac{x_{i+1,{\rm cry}}^{1/3} - x_{i,{\rm cry}}^{1/3}}{2\, n_{\rm cry}^{1/3} \nu_{\rm vib}} e^{E_{\rm a,for}/k_{\rm B} T_{{\rm c},k}^{n+1}} \qquad \tau_{i,{\rm ens},k}^{n+1} = \frac{x_{i+1,{\rm cry}}^{1/3} - x_{i,{\rm cry}}^{1/3}}{2\, n_{\rm cry}^{1/3} \nu_{\rm vib}} e^{E_{\rm a,ens}/k_{\rm B} T_{{\rm c},k}^{n+1}} \tag{B.3.5}$$

$$\tau_{i,{\rm car},k}^{n+1} = \frac{a_{i+1,{\rm car}} - a_{i,{\rm car}}}{V_{0,{\rm car}}\, a_{\rm ox}\, n_{{\rm OH},k}^{n+1}} \sqrt{\frac{2\pi m_{\rm OH}}{k_{\rm B} T_{{\rm c},k}^{n+1}}} \ . \tag{B.3.6}$$

Genauigkeit der Diskretisierung Die Diskretisierung des Diffusionsterms in Glg. (B.3.2) ist von 2. Ordnung im Ort genau.

Der Advektionsterm (B.3.3) ist im Modell mit Hilfe eines Upwind-Verfahrens diskretisiert, d.h. die Diskretisierung des Advektionsterms berücksichtigt nur zwei radiale Stützstellen, die entgegengesetzt der Strömungsrichtung liegen. Die Genauigkeit der Diskretisierung beim Upwind-Verfahren ist lediglich von 1. Ordnung im Ort. Dies führt zu gewissen Abweichungen der numerischen Lösung von der tatsächlichen Lösung, die im Modell in Kauf genommen werden. Genauer ausgedrückt ruft das Upwind-Verfahren eine künstliche Diffusion hervor, die zusätzlich zur turbulenten Diffusion wirksam ist. Die Diskretisierung des Advektionsterms (B.3.3) der Genauigkeit von 2. Ordnung im Ort würde dem Abhilfe schaffen. Dies erfordert jedoch die Lösung des Systems von Transport-Reaktions-Gleichungen (2.6.17) auf einem gestaffelten Ortsgitter. Die Implementierung eines gestaffelten Gitters im Modell übersteigt jedoch den Rahmen dieser Arbeit.

Es sind Testrechnungen durchgeführt worden, bei denen einerseits ausschließlich der Diffusionsterm und andererseits ausschließlich der Advektionsterm in der Transport-Reaktions-Gleichung berücksichtigt wurde. Als Anfangsbedingung der Rechnungen wurde eine Sprungfunktion

$$c_{i,j}^{n=0} = \begin{cases} 1 & : \quad r \leq 10\,\mathrm{AU} \\ 0 & : \quad r > 10\,\mathrm{AU} \end{cases} \tag{B.3.7}$$

gewählt. Dabei erwies sich, daß der künstliche Diffusionskoeffizient, der durch den Advektionsterm hervorgerufen wird, ungefähr eine Größenordnung kleiner ist als der tatsächliche turbulente Diffusionskoeffizient D. Die Diffusion von Stoffen wird im Rahmen des Modells also um etwa $10\,\%$ überschätzt. Dies stellt eine akzeptable Genauigkeit für die Berechnung des Stofftransports im Modell dar.

Die Zeit-Diskretisierung in Glg. (B.3.2) ist wie bei der Differentialgleichung für die Flächendichte (B.2.1) von 1. Ordnung genau. Dies führt in der Anfangsphase der Modellrechnungen, während der sich das Anfangsmodell hin zur asymptotischen Lösung entwickelt und die Konzentrationen $c_{i,j}$ zeitlich deutlich variieren können, zu gewissen numerischen Fehlern. Für die überwiegende Dauer der Scheibenentwicklung variieren die $c_{i,j}$ allerdings mit globalen Größen wie der Temperatur und der Dichte, welche sich zeitlich sehr langsam verändern. Der Fehler der Zeit-Diskretisierung in Glg. (B.3.2) ist folglich für die Scheibenmodelle, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt werden, zu vernachlässigen.

Lösungsmethode Das System von Transport-Reaktions-Gleichungen (B.3.1) wird im Modell voll implizit gelöst. Aus diesem Grund wurden die expliziten Terme bei der Diskretisierung (B.3.2) bereits weggelassen.

Durch Umformung von Glg. (B.3.2) erhält man ein Schema

$$E_{i,j,k}\, c_{i,j,k-1}^{n+1} + F_{i,j,k}\, c_{i,j,k}^{n+1} + G_{i,j,k}\, c_{i,j,k+1}^{n+1} = -P_{i,j,k} \tag{B.3.8}$$

mit Koeffizienten $E_{i,j,k}$, $F_{i,j,k}$ und $G_{i,j,k}$ sowie einem Restterm $P_{i,j,k}$. Dies stellt ein tridiagonales Gleichungssystem für die Konzentration $c_{i,j}$ des Tracers j in der Erscheinungsform i dar. Die Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems erfolgt auf die gleiche Weise wie im Falle der Differentialgleichung für die Flächendichte in Abschnitt B.2 beschrieben.

Nun ist zu beachten, daß das System von Transport-Reaktions-Gleichungen (B.3.1) gekoppelt ist. Allerdings ist die Transport-Reaktions-Gleichung für einen Tracer j im Niveau

i ausschließlich mit den Transport-Reaktions-Gleichungen der Niveaus $i-1$ und $i+1$ gekoppelt. Im Niveau $i = 1$ besteht sogar nur eine Kopplung zum Niveau $i = 2$ und im Niveau $i = I_j$ nur eine Kopplung zum Niveau $i = I_j - 1$ (vergl. Glg. (B.3.4)).

Überdies laufen die im Modell berücksichtigten Reaktionen, die zur Veränderung der Eigenschaft i eines Tracers j führen, ausschließlich in einer Richtung ab:

- Der Kristallisationsgrad von Silikatstaub kann lediglich zunehmen; es existiert kein thermischer Prozeß, der Silikate vom kristallinen in den amorphen Zustand bringt.
- Der Radius von Kohlenstoff-Staubteilchen kann mittels der Oxidation durch OH lediglich abnehmen; es ist kein Prozeß im Modell berücksichtigt, der zu einer Vergrößerung der Kohlenstoff-Staubteilchen führt (die Kondensation von Ruß im chemischen Gleichgewicht ist in einer sauerstoffreichen Elementmischung nicht möglich).

Unter diesen Voraussetzungen kann das System von Transport-Reaktions-Gleichungen (B.3.1) sukzessiv gelöst werden, beginnend beim Niveau $i = 1$ (amorphes Silikat, Ruß-Teilchen mit größtem Radius), fortschreitend mit den Zwischenniveaus $i = 2 \ldots (I_j - 1)$, bis zuletzt die Transport-Reaktions-Gleichung des Niveaus $i = I_j$ (vollständig kristalliertes Silikat, Ruß-Teilchen vollständig verbrannt) gelöst wird. Diese Prozedur wird für alle Tracer j, d.h. Forsterit-Teilchen, Enstatit-Teilchen und Kohlenstoff-Staubteilchen, durchgeführt.

Größe der i-Gitter Testrechnungen ergaben, daß die Kristallisation der Silikate in der protoplanetaren Scheibe bei ausreichend hohen Temperaturen ein derart schneller Prozeß ist, daß beinahe ausschließlich die Niveaus des Kristallisationsgrads Null oder des Kristallisationsgrads Eins besetzt sind. Partiell kristallisierte Silikat-Teilchen kommen lediglich in geringen Konzentrationen vor ($c_{i,\mathrm{sil}} \lesssim 10^{-2}$ für $2 \le i \le I_{\mathrm{sil}} - 1$). Die Anzahl der Niveaus des Kristallisationsgrads x_i wird daher im Modell auf $I_{\mathrm{sil}} = I_{\mathrm{for}} = I_{\mathrm{ens}} = 3$ gesetzt. Es werden demzufolge nur Silikat-Teilchen der Kristallisationsgrade $x_1 = 0.0$, $x_2 = 0.5$ und $x_3 = 1.0$ im Modell berücksichtigt.

Für die Kohlenstoff-Teilchen wird mit der Vorgabe der MRN-Größenverteilung (2.4.3) als Anfangsverteilung ein Radius-Gitter mit 26 logarithmisch äquidistanten Stützstellen zwischen $a_1 = 0.25$ und $a_{26} = 0.005\,\mu\mathrm{m}$ gewählt. Zusätzlich werden 4 äquidistante Stützstellen mit $a_{27} = 0.004\ \ldots\ a_{30} = 0.001\,\mu\mathrm{m}$ definiert. Das höchste Niveau definiert Kohlenstoff-Teilchen, die vollständig verbrannt sind ($a_{I_{\mathrm{car}}} = 0$). Die Anzahl der Gitterpunkte I_{car} des Radius-Gitters für den Kohlenstoff beträgt insgesamt folglich 31.

Literaturverzeichnis

Abramowitz M., Stegun I.A., 1964, *Handbook of Mathematical Funktions*, General Publishing Company, Toronto

Allende Prieto C., Lambert D.L., Asplund M., 2002, *A Reappraisal of the Solar Photospheric C/O Ratio*, ApJ 573, L137-L140

Anders E., Grevesse N., 1989, *Abundances of the Elements – Meteoritic and Solar*, Geochimica et Cosmochimica Acta 53, 197-214

Anders E., Kerridge J.F., 1988, *Future Directions in Meteorite Research*, in: Meteorites and the Early Solar System, (Ed.) Kerridge J.F., Matthews M.S., University of Arizona Press, Tucson, 1155-1186

Balbus S.A., Hawley J.F., 1991, *A Powerful Local Shear Instability in Weakly Magnetized Disks I. Linear Analysis*, ApJ 376, 214-222

Beckwith S.V.W., Sargent A.I., 1993, *The Occurrence and Properties of Disks around Young Stars*, in: Protostars & Planets III, (Ed.) Levy E.H. & Lunine J.I., University of Arizona Press, Tuscon, 521-541

Bell K.R., Lin D.N.C., 1994, *Using FU Orionis Outbursts to Constrain Self-Regulated Protostellar Disk Models*, ApJ 427, 987-1004

Bockelée-Morvan D., Gautier D., Hersant F., Huré J.-M., Robert F., 2002, *Turbulent Radial Mixing in the Solar Nebula as the Source of Crystalline Silicates in Comets*, A&A 384, 1107-1118

Bohren C.F., Huffman D.R., 1983, *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, John Wiley & Sons, New York

Boss A.P., 1996, *Nonaxisymmetry in the Solar Nebula: Disk Evolution or Giant Gaseous Protoplanet Formation?*, Lunar and Planetary Science XXVII, 141-142

Boss A.P., 2000, *Possible Rapid Gas Giant Planet Formation in the Solar Nebula and other Protoplanetary Disks*, ApJ 536, L101-L104

Brucato J.R., Colangeli L., Mennella V., Palumbo P., Bussoletti E., 1999, *Mid-infrared Spectral Evolution of Thermally Annealed Amorphous Pyroxene*, A&A 348, 1012-1019

Bryden G., Różyczka M., Lin D.N.C., Bodenheimer P., 2000, *On the Interaction between Protoplanets and Protostellar Disks*, ApJ 540, 1091-1101

Cabot W., 1984, *The Nonaxisymmetric Baroclinic Instability in Thin Accretion Disks*, ApJ 277, 806-812

Chagelishvili G.D., Zahn J.-P., Tevzadze A.G., Lominadze J.G., 2003, *On Hydrodynamic Shear Turbulence in Keplerian Disks: Via Transient Growth to Bypass Transition*, A&A 402, 401-407

Crovisier J., Bockel'ee-Morvan D., 1999, *Remote Observations of the Composition of Cometary Volatiles*, Space Science Reviews 90, 19-32

Crovisier J., Leech K., Bockel'ee-Morvan D., Brooke T.Y., Hanner M.S., Altieri B., Keller H.U., Lellouch E., 1997, *The Spectrum of Comet Hale-Bopp (C/1995 01) Observed with the Infrared Space Observatory at $2.9\ AU$ from the Sun*, Science 275, 1904-1907

Cyr K.E., Sears W. D., Lunine J.I., 1998, *Distribution and Evolution of Water Ice in the Solar Nebula: Implications for Solar System Body Formation*, Icarus 135, 537-548

D'Alessio P., Cantó J., Calvet N., Lizano S., 1998, *Accretion Disks around Young Objects I. The Detailed Vertical Structure*, ApJ 500, 411-427

van Dishoeck E.F., Blake G.A., Draine B.T., Lunine J.I., 1993, *The Chemical Evolution of Protostellar and Protoplanetary Matter*, in: Protostars & Planets III., (Ed.) Levy E.H., Lunine J.I., University of Arizona Press, Tucson, 163-241

Draine B.T., 1985, *Tabulated Optical Properties of Graphite and Silicate Grains*, ApJS 57, 587-594

Drouart A., Dubrulle B., Gautier D., Robert F., 1999, *Structure and Transport in the Solar Nebula from Constraints on Deuterium Enrichment and Giant Planets Formation*, Icarus 140, 129-155

Duschl W. J., Gail H.-P., Tscharnuter W. M., 1996, *Destruction Processes for Dust in Protoplanetary Accretion Disks*, A&A 312, 624-642

Duschl W. J., Strittmatter P. A., Biermann P. L., 2000, *A Note on Hydrodynamic Viscosity and Selfgravitation in Accretion Disks*, A&A 357, 1123-1132

Fabian D., Jäger C., Henning Th., Dorschner J., Mutschke H., 2000, *Steps toward Interstellar Silicate Mineralogy V. Thermal Evolution of Amorphous Magnesium Silicates and Silica*, A&A 364, 282-292

Finocchi F., Gail H.-P., 1997, *Chemical Reactions in Protoplanetary Accretion Disks III. The Role of Ionisation Processes*, A&A 327, 825-844

Finocchi F., Gail H.-P., Duschl W. J., 1997, *Chemical Reactions in Protoplanetary Accretion Disks II. Carbon Dust Oxidation*, A&A 325, 1264-1279

Frank J., King A., Raine D., 1992, *Accretion Power in Astrophysics*, Cambridge University Press, Cambridge

Gail H.-P., 1998, *Chemical Reactions in Protoplanetary Accretion Disks IV. Multicomponent Dust Mixture*, A&A 332, 1099-1122

Gail H.-P., 2001, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks I. Stationary Disc Models with Annealing and Carbon Combustion*, A&A 378, 192-213

Gail H.-P., 2002, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks III. Carbon Dust Oxidation and Abundance of Hydrocarbons in Comets*, A&A 390, 253-265

Gail H.-P., 2003, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks IV. Metamorphosis of the Silicate Dust Complex*, A&A, im Druck

Grevesse N., Noels A., 1993, *Cosmic Abundances of the Elements*, in: Origin and Evolution of the Elements, (Ed.) Vangioni-Flam E. & Cassé M., Cambridge University Press, Cambridge, 15-25

Grossman L., 1972, *Condensation in the primitive solar nebula*, Geochimica et Cosmochimica Acta 36, 597-619

Haisch Jr. K.E., Lada E.A., Lada C.J., 2001, *Disk Frequencies and Lifetimes in Young Clusters*, ApJ 553, L153-L156

Hallenbeck S.L., Nuth III J.A., Daukantas P. L., 1998, *Mid-Infrared Spectral Evolution of Amorphous Magnesium Silicate Smokes Annealed in Vacuum: Comparison to Cometary Spectra*, Icarus 131, 198-209

Hallenbeck S.L., Nuth III J.A., Nelson R.N., 2000, *Evolving Optical Properties of Annealing Silicate Grains: From Amorphous Condensate to Crystalline Mineral*, ApJ 535, 247-255

Hanner M.S., Gehrz R.D., Harker D.E., Hayward T.L., Lynch D.K., Mason C.C., Russell R.W., Williams D.M., Wooden D.H., Woodward C.E., 1999, *Thermal Emission from the Dust Coma of Comet Hale-Bopp and the Composition of the Silicate Grains*, Earth, Moon and Planets 79, 247-264

Hanner M.S., Hackwell J.A., Russell R.W., Lynch D.K., 1994a, *Silicate Emission Feature in the Spectrum of Comet Mueller 1993a*, Icarus 112, 490-495

Hanner M.S., Lynch D.K., Russell R.W., 1994b, *The 8-13 Micron Spectra of Comets and the Composition of Silicate Grains*, ApJ 425, 274-285

Harker D.E., Desch S.J., 2002, *Annealing of Silicate Dust by Nebular Shocks at 10 AU*, ApJ 565, L109-L112

Hartmann L.W., 2000, *Observational Constraints on Transport (and Mixing) in Pre-Main Sequence Disks*, Space Science Reviews 92, 55-68

Hartmann L., Kenyon S.J., 1996, *The FU Orionis Phenomenon*, ARA&A 34, 207-240

Herbig G.H., Petrov P.P., Duemmler R., 2003, *High-Resolution Spectroscopy of FU Orionis Stars*, ApJ 595, 384-411

Hersant F., Gautier D., Huré J.-M., 2001, *A Two-dimensional Model for the Primordial Nebula Constrained by D/H Measurements in the Solar System: Implications for the Formation of Giant Planets*, ApJ 554, 391-407

Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B., 1964, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York

Honda M., Kataza H., Okamoto Y.K., Miyata T., Yamashita T., Sako S., Takubo S., Onaka T., 2003, *Detection of Crystalline Silicates around the T Tauri Star Hen 3-600A*, ApJ 585, L59-L63

Huré J.-M., Richard D., Zahn J.-P., 2001, *Accretion Discs Models with the β-Viscosity Prescription Derived from Laboratory Experiments*, A&A 367, 1087-1094

Keeley D.A., 1970, *The Static Structure of Long-Period Variable Stars*, ApJ 161, 643-655

Keller Ch., 2003, *Materietransport in Akkretionsscheiben*, Dissertation der Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg

Keller Ch., Gail H.-P., 2004, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks VI. Mixing by Large-Scale Radial Flows*, A&A , eingereicht

Klahr H.H., Bodenheimer P., 2003, *Turbulence in Accretion Disks: Vorticity Generation and Angular Momentum Transport via the Global Baroclinic Instability*, ApJ 582, 869-892

Kley W., Lin D.N.C., 1992, *Two-Dimensional Viscous Accretion Disk Models. I. On Meridional Circulations in Radiative Regions*, ApJ 397, 600-612

Kley W., Papaloizou J.C.B., Lin D.N.C., 1993, *On the Angular Momentum Transport Associated with Convective Eddies in Accretion Disks*, ApJ 416, 679-688

Koike C., Kaito C., Yamamoto T., Shibai H., Kimura S., Suto H., 1995, *Extinction Spectra of Corundum in the Wavelengths from UV to FIR*, Icarus 114, 203-214

Launder B.E., 1976, *Heat and Mass Transport*, in: Turbulence, (Ed.) Bradshaw P., Springer Verlag, Berlin, 231-287

Lenzuni P., Gail H.-P., Henning Th., 1995, *Dust Evaporation in Protostellar Cores*, ApJ 447, 848-862

Lichtenegger H.I.M., Kömle N.I., 1991, *Heating and Evaporation of Icy Particles in the Vicinity of Comets*, Icarus 90, 319-325

Lide R.D., 1995, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 78th Ed., CRC Press, Boca Raton etc.

Lin D.N.C., Papaloizou J., 1985, *On the Dynamical Origin of the Solar System*, in: Protostars & Planets II, (Ed.) Black D.C., Matthews M.S., University of Arizona Press, Tucson, 981-1072

Lynden-Bell D., Pringle J.E., 1974, *The Evolution of Viscous Discs and the Origin of the Nebular Variables*, MNRAS 168, 603-637

Marigo P., 2002, *Asymptotic Giant Branch Evolution at Varying Surface C/O Ratio: Effects of Changes in Molecular Opacities*, A&A 387, 507-519

Mathis J.S., Rumpl W., Nordsieck K.H., 1977, *The Size Distribution of Interstellar Grains*, ApJ 217, 425-433

Matsuyama I., Johnstone D., Hartmann L., 2003, *Viscous Diffusion and Photoevaporation of Stellar Disks*, ApJ 582, 893-904

McComb W. D., 1990, *The Physics of Fluid Turbulence*, Oxford Science Publications

Mie G., 1908, *Beiträge zur Optik trüber Medien speziell kolloidaler Metallösungen*, Ann. Phys. 25, 377-445

Mihalas D., 1978, *Stellar Atmospheres*, W. H. Freeman & Co., San Francisco

Morfill G.E., 1983, *Some Cosmochemical Consequences of a Turbulent Protoplanetary Cloud*, Icarus 53, 41-54

Morfill G.E., 1985, *Physics and Chemistry in the Primitive Solar Nebula*, in: Birth and Infancy of Stars, (Ed.) Lucas R., Omont A., Stora R., North-Holland Physics Publishing Division, Amsterdam, 693-792

Morfill G.E., Völk H.J., 1984, *Transport of Dust and Vapor and Chemical + Fractionation in the Early Protosolar Cloud*, ApJ 287, 371-395

Nakamoto T., Nakagawa Y., 1994, *Formation, Early Evolution, and Gravitational Stability of Protoplanetary Disks*, ApJ 421, 640-650

Nakamoto T., Nakagawa Y., 1995, *Growth of Protoplanetary Disks around Young Stellar Objects*, ApJ 445, 330-336

Nuth III J.A., Donn B., 1982, *Laboratory Measurements of Amorphous Silicate Smokes and the Infrared Spectra of Oxygen-Rich Stars*, ApJ 257, L103-L105

Paczyński B., 1978, *A Model of Selfgravitating Accretion Disk*, Acta Astronomica 28, 91-109

Philpotts A.R., 1990, *Principles of Igneous and Metamorphic Petrology*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey

Pollack J.B., Hollenbach D., Beckwith S., Simonelli D.P., Roush T., Fong W., 1994, *Composition and Radiative Properties of Grains in Molecular Clouds and Accretion Disks*, ApJ 421, 615-639

Portinari L., Chiosi C., Bressan A., 1998, *Galactic Chemical Enrichment with New Metallicity Dependent Stellar Yields*, A&A 334, 505-539

Press W. H., Teukolsky S.A., Vetterling W. T., Flannery B.P., 1992, *Numerical Recipes in FORTRAN*, Cambridge University Press, Second Edition

Pringle J.E., 1981, *Accretion Discs in Astrophysics*, ARA&A 19, 137-162

Regev O., Gitelman L., 2002, *Asymptotic Models of Meridional Flows in Thin Viscous Accretion Disks*, A&A 396, 623-628

Richard D., Zahn J.-P., 1999, *Turbulence in Differentially Rotating Flows. What Can Be Learned from the Couette-Taylor Experiment*, A&A 347, 734-738

Różyczka M., Bodenheimer P., Bell K.R., 1994, *A Numerical Study of Viscous Flows in Axisysmmetric α-Accretion Disks*, ApJ 423, 736-747

Ruden S.P., Pollack J.B., 1991, *The Dynamical Evolution of the Protosolar Nebula*, ApJ 375, 740-760

Schwarzschild M., 1958, *Structure and Evolution of the Stars*, Princeton University Press, Princeton

Shakura N.I., Sunyaev R.A., 1973, *Black Holes in Binary Systems. Observational Appearance*, A&A 24, 337-355

Sharp C.M., Huebner W. F., 1990, *Molecular Equilibrium with Condensation*, ApJS 72, 417-431

Shu F.H., Johnstone D., Hollenbach D., 1993, *Photoevaporation of the Solar Nebula and the Formation of the Giant Planets*, Icarus 106, 92-101

Stepinski T.F., 1998, *New Approach to Diagnosing Properties of Protoplanetary Disks*, ApJ 506, 361-370

Stevenson D.J., Lunine J.I., 1988, *Rapid Formation of Jupiter by Diffusive Redistribution of Water Vapor in the Solar Nebula*, Icarus 75, 146-155

Takeuchi T., Lin D.N.C., 2002, *Radial Flow of Dust Particles in Accretion Disks*, ApJ 581, 1344-1355

Taylor G.I., 1936a, Proc. R. Soc. London 157, 546

Taylor G.I., 1936b, Proc. R. Soc. London 157, 565

Timmes F. X., Woosley S.E., Weaver T.A. 1995, *Galatic Chemical Evolution: Hydrogen through Zinc*, ApJS 98, 617-658

Urpin V. A., 1984, *Hydrodynamic Flows in Accretion Disks* (English Translation), Astronomicheskii Zhurnal 61, 84-90

Waldmann L., 1958, *Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck*, in: Encyclopedia of Physics Vol. XII, (Ed.) Flügge S., Springer, Berlin, 295-514

Wehrstedt M., Gail H.-P., 2002, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks II. Time Dependent Disk Models with Annealing and Carbon Combustion*, A&A 385, 181-204

Wehrstedt M., Gail H.-P., 2003, *Radial Mixing in Protoplanetary Accretion Disks V. Models with Different Element Mixtures*, A&A 410, 917-935

Weidenschilling S.J., Cuzzi J.N., 1993, *Formation of Planetesimals in the Solar Nebula*, in: Protostars & Planets III, (Ed.) Levy E.H., Lunine J.I., University of Arizona Press, Tucson, 1031-1060

Weinberger A.J., Becklin E.E., Schneider G., Chiang E.I., Lowrance P. J., Silverstone M., Zuckerman B., Hines D.C., Smith B.A., 2002, *Infrared Views of the TW Hydra Disk*, ApJ 566, 409-418

Wendt F., 1933, Ingenieur-Archiv IV, 577

Yanamandra-Fisher P. A., Hanner M.S., 1999, *Optical Properties of Nonspherical Particles of Size Comparable to the Wavelength of Light: Application to Comet Dust*, Icarus 138, 107-128

Danksagung

Diese Arbeit wurde durch ein Stipendium der Landesgraduiertenförderung Baden-Württemberg sowie mit Mitteln aus dem Sonderforschungsbereich 359 der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziert.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. H.-P. Gail, ohne dessen hilfreiche Betreuung diese Arbeit so nicht möglich gewesen wäre.

Ich bedanke mich herzlich bei Herrn Prof. Dr. M. Camenzind für die Erstellung des Zweitgutachtens.

Den Mitgliedern des ITA danke ich herzlich für die freundliche Arbeitsatmosphäre und jede zuteil gewordene Hilfestellung. Namentlich möchte ich mich bedanken bei Martina Buchhaupt, Andrea Ferrarotti, Farid Gamgami, Gunther Kaliwoda, Dr. Christoph Keller, Michael Mayer, Prof. Dr. Wolfgang J. Duschl und Herrn Prof. Dr. W. M. Tscharnuter.

Ich danke herzlich meiner Mutter und meiner ganzen Familie für ihre fortwährende Unterstützung. Besonders danke ich Markus für seine liebevolle Art und die vielen hilfreichen Gespräche. Ich danke auch Barbaras Familie, die ich lieb gewonnen habe.

Herzlich bedanke ich mich bei den Mitgliedern und Freunden der Evangelisch-Freikirchlichen Gemeinde in Heidelberg für das liebevolle Miteinander und jedes Gebet. Darüber hinaus danke ich jedem, der mich im Gebet begleitet hat.

Ich danke Barbara von ganzem Herzen für ihre Liebe, ihre Herzlichkeit sowie für ihr Ausharren und alle Hilfe, die sie mir während der Doktorarbeit hat zuteil werden lassen. :*

Ich danke Dir, Jesus, von ganzem Herzen, daß Du mein Leben verändert hast und mich liebst.