

Staubzerstörung durch interstellare Stoßfronten

Dissertation zur Erlangung des
naturwissenschaftlichen Doktorgrades der
Bayerischen Julius-Maximilians-Universität
Würzburg

Vorgelegt von
Roland Völker
aus Kronach

Würzburg 2003

Eingereicht am:
bei der Fakultät für Physik und Astronomie

1. Gutachter: Dr. H. W. Yorke
2. Gutachter: Prof. Dr. J. C. Niemeyer
der Dissertation

1. Prüfer: Dr. H. W. Yorke
2. Prüfer: Prof. Dr. G. Reents
der mündlichen Prüfung

Tag der mündlichen Prüfung:

Doktorurkunde ausgehändigt am:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Staubphysik	7
2.1	Kühlung des Mediums durch Staub	7
2.2	Molekülbildung auf Stauboberflächen	8
2.3	Elektrische Ladung auf Staubpartikeln	8
2.4	Beschleunigung der Staubpartikel	9
2.4.1	Direkte Reibung mit dem Gas	9
2.4.2	Coulomb-Reibung	10
2.5	Kontinuierliche Staubzerstörungsprozesse	13
2.6	Staubpartikelkollisionen	16
2.6.1	Kraterbildung	16
2.6.2	Abgetragene Masse	17
3	Staubmodell ohne Ortsauflösung	23
3.1	Staubdynamik	23
3.2	Numerik	25
3.2.1	Integrationsgitter	25
3.2.2	Transportterme	27
3.2.3	Stoßterme	27
3.2.4	Berechnung des Zeitschritts	28
4	Ergebnisse der Rechnungen ohne Ortsauflösung	32
4.1	Kopplung	34
4.2	Sputtering	38
4.3	Streuprozesse	40
5	Stationäres 1D-Staubmodell	43
5.1	Gleichungen	43
5.2	Diskretisierung der Staubgleichungen	44
5.3	Stationäre Lösung der hydrodynamischen Gleichungen	46
5.3.1	Das Gleichungssystem	46
5.3.2	Randbedingungen	48
5.4	Berechnung des Ortsschritts	50
6	Chemische und physikalische Prozesse	52
6.1	Zusammensetzung des Gases	52
6.2	Chemische Reaktionen	52
6.3	Kühlung	53

6.4 Ionisationszustand des Gases	54
7 Ergebnisse der Rechnungen mit Ortsauflösung	55
7.1 Sputtering	57
7.2 Streuprozesse	59
7.3 Gesamteffekt	61
7.4 Diskussion	63
8 Zusammenfassung und Ausblick	66
Anhang	
A Abschätzungen zur Ionisation des interstellaren Gases	68
B Modellbeispiele: Kratermasse	70
C Berechnung der 1D-Transportterme	71
D Gleichungssystem	72
Literaturverzeichnis	75

1 Einleitung

Ein großer Teil der schweren Elemente in der *interstellaren Materie* (ISM) liegt in der Form von zu winzigen Festkörpern kondensierter Materie vor, die mit dem interstellaren Gas vermischt sind. Man spricht dabei von interstellarem Staub. Die Größe der Staubteilchen variiert zwischen etwa 1 nm und 1 μm . Durch den Vergleich von Beobachtungsdaten mit theoretisch berechneten Absorptionskurven bestimmten Mathis, Rumpl und Nordsieck (1977)^[30] eine Größenverteilung für die Partikel, die in Anlehnung an die Namen der Autoren dieser Arbeit als MRN-Verteilung bezeichnet wird. Demnach wird die Teilchendichte als Funktion des Radius durch eine Potenzfunktion mit einem Exponenten zwischen -3.3 und -3.6 beschrieben. Die Staubteilchen selbst bestehen im wesentlichen aus Silikaten, Graphit, aromatischen Kohlenstoffstrukturen, die durch aliphatische Ketten verbunden sind (Ruß), SiC, Aluminiumoxiden und polyzyklischen, aromatischen Hydrocarbonat-Molekülen (Gehrz 1989,^[17] Tielens 1990^[51]). Staub wird nach unserer heutigen Vorstellung in Novae, Supernova-Explosionen und den Ausströmungen von roten Riesen- und Überriesensternen gebildet.

Obwohl der Anteil des Staubes an der Gesamtmasse der ISM nur etwa ein Prozent beträgt (siehe dazu Spitzer (1978)^[46]) kann sein Einfluß auf das Strahlungsfeld und die Dynamik des Gases in nicht vernachlässigt werden. So ist er die Hauptursache für die Extinktion, die seit jeher eine große Einschränkung für astronomische Beobachtungen darstellt. Staub ist maßgeblich für die Streuung und die Polarisierung von Licht verantwortlich. Außerdem stellt der Staub ein wichtiges Kühlmittel für das interstellare Gas dar und beeinflusst die chemischen Prozesse innerhalb der ISM. Die Oberflächen der Partikel begünstigen die Bildung von Molekülen, indem sie als Katalysator wirken.

Die Theorie der Sternentstehung ist ein zentrales Gebiet der Astrophysik. Während die Entwicklung der Sterne nach dem Erreichen der Hauptreihe heute gut bekannt ist, sind die Prozesse, die mit der Bildung neuer Sterne einhergehen häufig nur unzureichend verstanden. Der Staub spielt dabei eine wichtige Rolle. So wird beispielsweise vermutet, daß die von einem Stern durch Akkretion maximal erreichbare Masse vom vorhandenen Staub abhängt. Siehe dazu Kahn (1974)^[25] und Wolfire und Cassinelli (1987).^[55] Der Staub in dichten Molekülwolkenkernen beeinflusst die Vorgänge, die zur Bildung neuer Sterne führen. Yorke (1979)^[61] untersuchte die Dynamik und den thermischen Zustand des Gases in der Umgebung junger Sterne. Yorke und Henning (1994)^[58] zeigten, daß die optischen Eigenschaften des protostellaren Mediums, wie Opazität und Streuung im Wellenlängenbereich von einigen mm bis ins nahe Ultraviolett, im wesentlichen durch den Staub beeinflusst werden. Wie Yorke (1977, 1980),^[60, 62] Sonnhalter, Preibisch und Yorke (1995)^[44] und Yorke, Bodenheimer und Laughlin (1993, 1995)^[56, 57] zeigten, hängen die optische Erscheinung protostellarer Objekte und die Entwicklung protostellarer Scheiben stark von dem zugrunde gelegten Staubmodell ab.

Ein interessantes Phänomen, das mit der Bildung von Sternen einhergeht, ist das Auftreten bipolarer, eng kollimierter Ausströmungen, den sogenannten protostellaren Jets. In dichte Molekülwolkenmaterie propagierende Jets wurde erstmals von Suttner et al. (1997),^[48] Smith et al. (1997, 1997)^[41, 42] und Völker et al. (1999)^[53] numerisch untersucht. Sie verwendeten dazu einen Hydrodynamik-Code, der die Dissoziation und Reassoziierung von molekularem Wasserstoff berücksichtigt. In diesem Modell spielt interstellarer Staub eine wichtige Rolle. Er macht durch seine katalytische Wirkung die Bildung von Wasserstoffmolekülen möglich, dient außerdem als Kühlmittel und hat so einen starken Einfluß auf die Dynamik der modellierten Jets. Der Staub wird in diesen Modellen nur sehr grob behandelt, indem die Staubbichte an die Dichte des Gases gekoppelt wird. In Stoßwellen, wie beispielsweise der Bugstoßwelle protostellarer Jets, können Staubpartikel durch verschiedene Mechanismen zerstört werden. Das Fehlen von Staub kann sich auf die dynamischen Vorgänge in den Jets auswirken, was eine genauere Untersuchung der destruktiven Staubprozesse im Zusammenhang mit molekularen Jets nahelegt.

Staubpartikel sind nicht unveränderlich. Sie unterliegen Wachstums- und Zerstörungsprozessen. Allerdings kommt man allein durch Beobachtungen nur zu wenig direkten Erkenntnissen, was theoretische Modelle nötig macht. Einen ersten Ansatz dazu machte Smoluchowski (1916),^[43] indem er eine Gleichung einführte, die die Änderung der Staubverteilung durch die Effekte von Partikelkollisionen beschreibt.

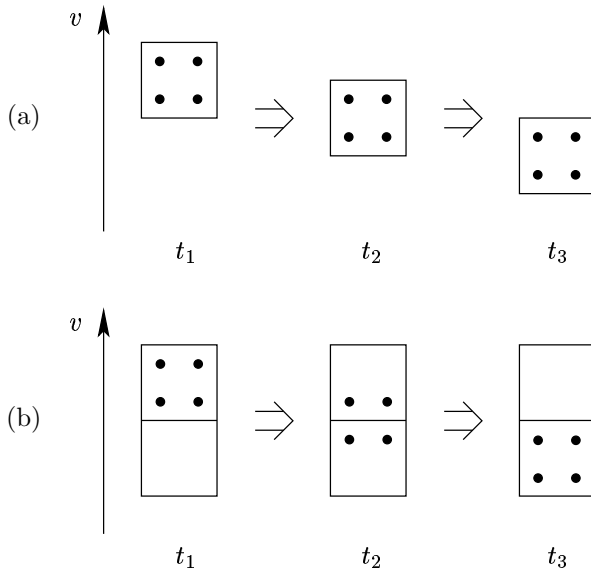


Abbildung 1.1: Vergleich der Beschleunigung von Staubpartikeln, wie sie durch zwei unterschiedliche Modelle beschrieben wird. Es wird exemplarisch die Abbremsung von vier Teilchen aus einem festen Massenintervall betrachtet. (a) Jeder Teilchensorte ist *eine* mittlere Geschwindigkeit zugeordnet. Die Beschleunigung erfolgt über die Änderung dieser Geschwindigkeit. (b) Jeder Teilchensorte sind verschiedene Zellen zugeordnet, die ein Geschwindigkeitsintervall überdecken. Die Geschwindigkeiten, die jeder Zelle zugeordnet sind, bleiben konstant. Die Teilchen werden beschleunigt, indem sie in eine Zelle mit einer anderen Geschwindigkeit wechseln.

Großkinsky et al. (2002)^[18] leitete diese sogenannte *Koagulationsgleichung* mathematisch rigoros aus einem mikroskopischen, stochastischen Modell her. Analytische Lösungen dieser Gleichung werden in den Arbeiten von Dorschner (1982)^[10] und Hayakawa und Hayakawa (1988)^[19] für stationäre Fälle angegeben. Von Kessel'man und Frolov (1986)^[27] wurden komplizierte zeitabhängige numerische Rechnungen durchgeführt.

Einen anderen Weg beschrrieben Gail und Sedlmayr (1984, 1988)^[14, 15] Sie verwendeten eine *Momentenmethode*, um das Staubwachstum zu berechnen. Darauf aufbauend stellten Dominik et al. (1989)^[8] einen Formalismus vor, der es ermöglicht, die Form des Größenspektrums der Staubteilchen abzuleiten. Die Methode wurde von verschiedenen Autoren weiterentwickelt. Gauger et al. (1990)^[16] erweiterten das Modell, indem sie die Evaporation von Staubmaterial einfügten. Dominik et al. (1993)^[9] berücksichtigten die Behandlung von heterogen zusammengesetzten Partikeln. Das Modell ist jedoch in zweifacher Hinsicht problematisch (vgl. Krüger et al. 1995)^[28] Zum einen ist die Effizienz von Wachstums- und Zerstörungsprozessen stark von einer Potenz des Staubpartikelradius abhängig und zum anderen ist es mit dieser Methode nicht möglich diskontinuierliche Prozesse zu behandeln, wie etwa die Koagulation oder die Fragmentation von Staubteilchen durch Stöße mit anderen Partikeln.

Daniels und Hughes (1981)^[7] und Fulle (1992)^[13] berechneten die Größenverteilung der Staubteilchen mit Hilfe von *Monte-Carlo-Simulationen*. Für diese auf Zufallszahlen basierenden Methoden gelten keine Einschränkungen bezüglich der zu modellierenden Staubprozesse. Allerdings benötigen sie lange Rechenzeiten, was es schwierig macht, sie zusammen mit iterativen Algorithmen zur Lösung der hydrodynamischen Gleichungen zu verwenden.

Ein andere Methode wurde von Jones et al. (1994, 1996)^[22, 23] verwendet, um die Zerstörung von Staubpartikeln in interstellaren Stoßwellen zu modellieren. Darin werden 18 Massen-Bins für zwei unterschiedliche Partikelsorten implementiert, denen jeweils eine eigene Geschwindigkeit zugeordnet ist. Daraus resultieren 72 Differentialgleichungen, die simultan integriert werden müssen. Die Wechselwirkungen, denen die Staubpartikel beim Durchgang durch die Stoßfront und im Nachstoßgebiet unterworfen sind, werden zeitabhängig berechnet. Dabei wird ein fest vorgegebenes Schockprofil zugrunde gelegt. Das Modell stellt eine Fortsetzung der Arbeit von McKee et al. (1987)^[32] dar und verwendet eine detaillierte Staubphysik, die in der Veröffentlichung von Tielens et al. (1994)^[52] beschrieben wird. Das Modell selbst beruht auf früheren Koagulationsmodellen von Nakagawa et al. (1981)^[34] und Mizuno et al. (1988).^[33] Ähnliche Modelle wurden verwendet, um die Staubbentwicklung in anderen astrophysikalischen Kontexten zu

bestimmen. So untersuchten z. B. Rossi et al. (1991)^[35] das Staubwachstum in kollabierenden Molekülwolken unter der Berücksichtigung von Partikelkollisionen. Suttner et al. (1999)^[49, 50] führten numerische zweidimensionale Rechnungen zur Staubkoagulation in protostellaren Akkretionsscheiben durch.

In den Arbeiten von Jones et al. (1994, 1996)^[22, 23] wird die Entwicklung von Staubteilchen beim Durchgang einer Stoßwelle berechnet. Die Hydrodynamik stellt dabei eine Randbedingung dar. Eine Rückwirkung des Staubs auf das Gas wird nicht berücksichtigt. Das Modell beruht auf vereinfachenden Annahmen, die die Rechnungen effektiv und ressourcenschonend machen, aber auch einige prinzipielle Schwächen in sich bergen. Diese sollen nun anhand von Beispielen verdeutlicht werden und es soll aufgezeigt werden, wie diese durch eine verallgemeinerte Beschreibung überwunden werden können.

Die Staubteilchen eines Ensembles besitzen unterschiedliche Massen und Geschwindigkeiten. In dem von Jones et al. (1994, 1996)^[22, 23] verwendeten Modell werden die Staubpartikel allein durch ihre Masse charakterisiert. Dazu wird das Massenspektrum in einzelne Intervalle aufgeteilt. Das Modell beruht auf der vereinfachenden Annahme, daß sich alle Teilchen eines Massenbins i mit einer mittleren, zeitabhängigen Geschwindigkeit bewegen.

$$\langle v_i \rangle(t) = v_i(t) . \quad (1.1)$$

Durch äußere Kräfte können die Teilchen kontinuierlich beschleunigt werden. In dem Modell wird dieser Vorgang durch die Änderung der mittleren Intervallgeschwindigkeit $v_i(t)$ beschrieben. In Abbildung 1.1(a) ist die Abbremsung der Teilchen aus einem Massenintervall dargestellt. Zu verschiedenen Zeitpunkten besitzt die Intervallgeschwindigkeit unterschiedliche Werte.

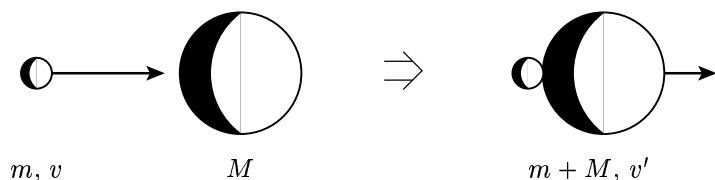


Abbildung 1.2: Vollständig inelastischer Stoß zweier Teilchen.

Aufgrund der verschiedenen Geschwindigkeiten, die die Teilchen eines Ensembles aufweisen, kann es zu Kollisionen kommen. Dabei können sich beide Stoßpartner zu neuen Teilchen verbinden, in kleinere Fragmente zerschlagen werden oder auch nur ihre Geschwindigkeit ändern. Dies führt zu einer Neuverteilung der Staubteilchen innerhalb des Ensembles. In Abbildung 1.2 ist der vollständig inelastische Zusammenstoß zweier Teilchen unterschiedlicher Masse dargestellt. Das dabei entstehende Produktteilchen vereinigt die gesamte Masse der Stoßpartner auf sich und besitzt die Geschwindigkeit, die von der Impulserhaltung vorgegeben ist. In Abbildung 1.3(a) ist angedeutet, wie dieser Vorgang im Rahmen des Modells beschrieben wird. Ein leichtes Teilchen verbindet sich mit einem schweren. Das dabei entstehende Teilchen wird auf das Intervall, das mit der Gesamtmasse korreliert ist, verteilt.

Anhand dieses Beispiels wird eine Grenze des Modells deutlich. Entsteht bei einem Zweierstoß ein neues Teilchen, wird es auf ein neues Massenintervall verteilt. Dabei nimmt es dessen Geschwindigkeit an, was eine Verletzung der Impulserhaltung bedeutet. Außerdem kann das Modell keine Stöße von Teilchen aus dem gleichen Massenintervall beschreiben, da sich alle Mitglieder nur mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen können.

Die Modellierung von Teilchenströmungen mit Hilfe einer solchen Methode führt zu weiteren Schwierigkeiten. Dies soll anhand des Beispiels einer eindimensionalen Strömung erläutert werden. In Abbildung 1.4(a) sind zwei entgegengerichtete, räumlich getrennte Ströme von Partikeln identischer Masse dargestellt. Alle Geschwindigkeiten sollen den gleichen Betrag haben und die Partikeldichte soll an jedem Ort gleich sein. Die Teilchen treffen sich in der Mitte und sollen nicht miteinander wechselwirken können. Abbildung 1.4(b) zeigt die Situation zu einem späteren Zeitpunkt. Wegen der Abwesenheit einer Wechselwirkung haben sich beide Ströme in einem zentralen Bereich Δl durchdrungen. Die Dichte der Teilchen ist hier doppelt so groß und es existieren am selben Ort gleich große Teilchen mit entgegengesetzter Geschwindigkeit.

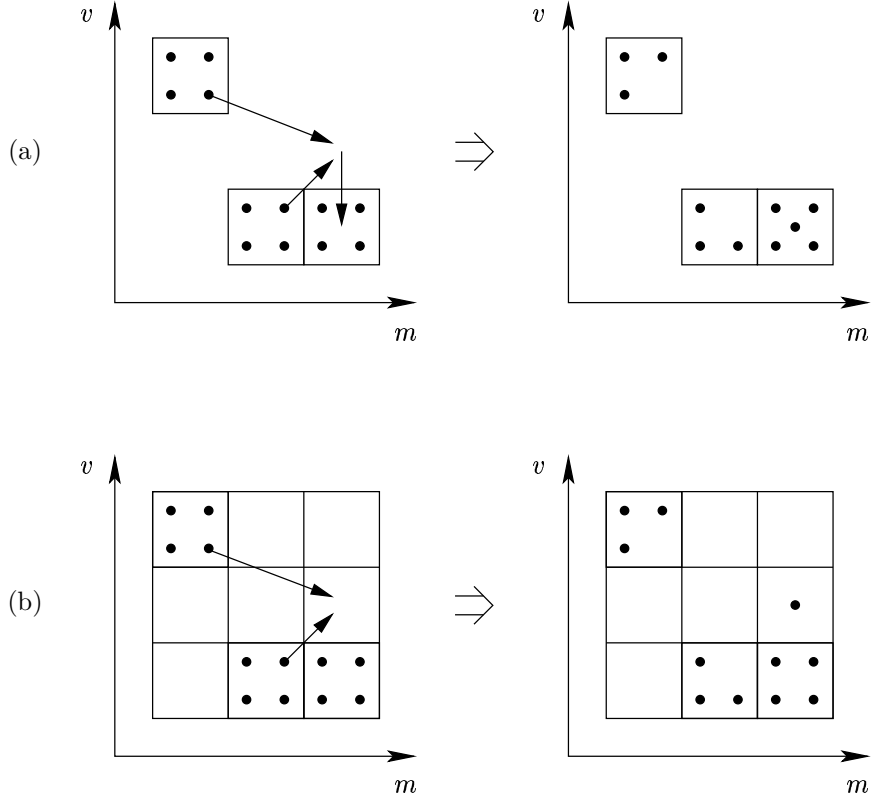


Abbildung 1.3: Beschreibung eines vollständig inelastischen Stoßes zweier Staubpartikel (a) in einem Modell, das jeder Teilchensorte eine mittlere Geschwindigkeit zuordnet und (b) in einem Modell, in dem die Teilchen durch ihre Masse und die Geschwindigkeit charakterisiert werden.

Mit einem Modell, in dem an einem bestimmten Ort allen Teilchen gleicher Masse die gleiche Geschwindigkeit zugeordnet ist, kann dieses Szenario nicht beschrieben werden. Abbildung 1.5 verdeutlicht die Problematik. Die x -Achse ist in diskrete Zellen aufgeteilt, in deren Mittelpunkten die Teilchendichten lokalisiert sind. Die Geschwindigkeiten, die auf den Grenzen definiert sind, sorgen dafür, daß Teilchen in die benachbarte Gitterzelle wechseln können. Zu Beginn sind alle Zellen gleich stark besetzt.

$$n_i = n_0 . \quad (1.2)$$

Die Geschwindigkeiten besitzen den gleichen Betrag,

$$|v_{i+1/2}| = v_0 , \quad (1.3)$$

wobei das Vorzeichen in der zentralen Zelle k wechselt.

Mit Hilfe eines einfachen expliziten Integrationsschemas läßt sich die Änderung der Teilchendichte einer Zelle i zum Zeitpunkt j bestimmen:

$$\left(n_i^{j+1} - n_i^j \right) \frac{\Delta x_i}{\Delta t} = \tilde{n}_i^j v_{i-1/2}^j - \tilde{n}_{i+1}^j v_{i+1/2}^j , \quad (1.4)$$

wobei

$$\tilde{n}_i^j = \begin{cases} n_{i-1}^j & \text{wenn } v_{i-1/2} \geq 0 \\ n_i^j & \text{wenn } v_{i-1/2} < 0 \end{cases} . \quad (1.5)$$

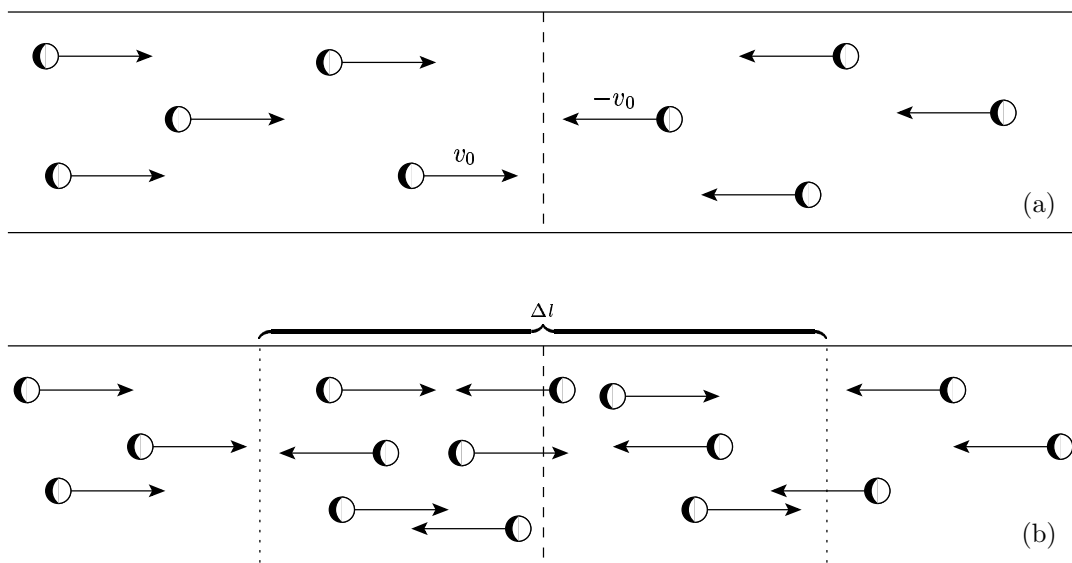


Abbildung 1.4: Durchdringung zweier Teilchengruppen, die sich gegeneinander bewegen und nicht miteinander wechselwirken.

In die mittlere Zelle dringen von beiden Seiten Teilchen ein. Da pro Teilchensorte am Zellenrand nur eine Geschwindigkeit möglich ist, müssen sich in der mittleren Zelle mit der Zeit immer mehr Teilchen ansammeln. Ein Durchdringen gleichartiger Partikel ist nicht möglich. Dieses Verhalten führt bei der Modellierung komplexer Teilchenströmungen unweigerlich zu Komplikationen. Eine Beschreibung mehrdimensionaler Szenarien ist nicht möglich.

Diese Schwierigkeiten lassen sich prinzipiell nur dadurch überwinden, daß man zusätzlich zu den Massen- auch Geschwindigkeitsintervalle einführt. Abbildung 1.1(b) verdeutlicht, wie die Abbremsung einer Gruppe von Teilchen in diesem Modell beschrieben wird. Das Gebiet der möglichen Geschwindigkeiten ist hier in einzelne Intervalle unterteilt, die im Verlauf der Rechnung unverändert bleiben. Auf diese Weise ist es möglich, eine Situation zu beschreiben, in der sich Teilchen gleicher Masse aber verschiedener Geschwindigkeit am gleichen Ort aufhalten. Während in der ursprünglichen Beschreibung die Veränderung der mittleren Geschwindigkeit des Massenbins berechnet wird, wird hier die Beschleunigung der verschiedenen Staubteilchen berechnet. Dadurch wechseln die Teilchen sukzessive in das nächste Geschwindigkeitsintervall. Die Änderung der mittleren Geschwindigkeit wird hier durch die Umverteilung der Staubteilchen auf die einzelnen Bins erreicht. Das Geschwindigkeitsmittel der Partikel aus einem Massenbereich muß nun über alle Geschwindigkeitsintervalle gebildet werden,

$$\langle v_i \rangle(t) = \frac{\sum_j v_j n_{i,j}(t)}{\sum_j n_{i,j}(t)}. \quad (1.6)$$

Dabei sind die Geschwindigkeiten v_j , die den einzelnen Geschwindigkeitsintervallen zugeordnet sind, konstant.

Mit Hilfe dieses Schemas lassen sich nun auch Streuprozesse zwanglos beschreiben. Die Impulserhaltung ist in diesem Fall gewährt, da die entstehenden Teilchen auf das entsprechende Geschwindigkeitsintervall verteilt werden können. In Abbildung 1.3(b) ist der vollständig inelastische Stoß zweier Teilchen abgebildet, wie er sich in diesem Modell darstellt. Das entstehende Teilchen kann auf die jeweils passende Zelle verteilt werden, so daß sowohl Impuls als auch die Gesamtmasse erhalten bleiben. Die Genauigkeit hängt dabei allein von der Größe der Intervalle ab.

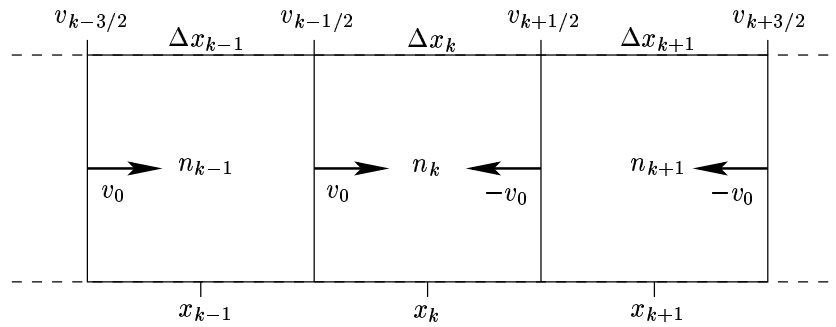


Abbildung 1.5: Entgegengerichtete Strömungen gleichartiger Teilchen können mit einem Modell, in dem jeder Partikelsorte genau eine Geschwindigkeit zugeordnet ist, nicht beschrieben werden. Da am Zellenrand je Teilchensorte nur eine Geschwindigkeit definiert ist, sammeln sich in der mittleren Zelle mit der Zeit immer mehr Teilchen an. Die Partikelströme können sich aus diesem Grund nicht durchdringen.

Diese Arbeit hat zum Ziel, auf der Basis der oben skizzierten Ideen ein Modell zur Beschreibung dynamischer Staubprozesse zu entwickeln. Mit ihrer Hilfe soll die Entwicklung von Staubpartikeln in interstellaren Stoßwellen studiert werden, wobei das Hauptaugenmerk auf den destruktiven Vorgängen liegen soll. Die hydrodynamischen Prozesse sollen simultan dazu berechnet werden und dabei die Rückwirkung des Staubes auf das Gas berücksichtigt werden. Für die Berechnung der Hydrodynamik wird ein Code verwendet, der von Suttner et al. (1997),^[48] Smith et al. (1997, 1997)^[41, 42] und Völker et al. (1999)^[53] zur Modellierung protostellarer Jets verwendet wurde.

2 Staubphysik

Interstellarer Staub steht mit dem ihn umgebenden Medium in Wechselwirkung. Seine Anwesenheit trägt zur Abkühlung des Gases und zur Bildung von Molekülen bei, wobei er als Katalysator wirkt. Umgekehrt werden die Staubpartikel durch den Einfluß des Umgebungsgases korrodiert. Durch Kollisionen untereinander können die Staubteilchen fragmentiert oder vaporisiert werden. In den folgenden Abschnitten werden die physikalischen Prozesse, die in dem Modell Berücksichtigung finden, besprochen.

Neben den Zerstörungsprozessen gibt es auch Mechanismen, die zu einem Wachstum der Staubpartikel führen. Da die Zeitskalen dafür vergleichsweise groß sind, können Staubteilchen nur in der Abwesenheit von korrosiven Prozessen effektiv wachsen. Mit dem hier vorgestellten Modell sollen Zerstörungsmechanismen, die mit Stoßwellen einhergehen, untersucht werden. Aus diesem Grund bleiben Wachstumsprozesse unberücksichtigt.

2.1 Kühlung des Mediums durch Staub

Die Temperatur des Gases wird durch den in ihm enthaltenen Staub beeinflusst. Bei Zusammenstößen von thermischen Gasatomen mit den Staubteilchen geben diese einen Teil ihrer kinetischen Energie ab. Es werden in den Staubkörnern Phononen angeregt, die ihre Anregungsenergie in Form von Wärmestrahlung wieder abgeben. Dadurch kommt es zur Abkühlung des Gases.

Ein Gasatom bewege sich mit der thermischen Geschwindigkeit v_{th} in einem Gebiet, das mit sphärischen Staubteilchen mit dem Radius a angefüllt ist. Beträgt die Partikeldichte n_g , erleidet es in einem vorgegebenen Zeitintervall $n_g v_{th} \pi a^2$ Kollisionen. Die dabei übertragene Energie kann mit $k_B(T - T_d)$ abgeschätzt werden, wobei T_d die Staubtemperatur ist. Damit ergibt sich für den Kühlungsterm (siehe Suttner (1997)^[47])

$$\Lambda^- = n v_{th} n_g \pi a^2 k_B(T - T_d) , \quad (2.1)$$

mit der thermischen Geschwindigkeit der Gasatome

$$v_{th} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi \mu m_H}} . \quad (2.2)$$

Dabei ist μ das mittlere Molekulargewicht des Gases und m_H die Masse eines Wasserstoffatoms. Ist die Gastemperatur T kleiner als die Temperatur des Staubs, wird Energie auf das Gasatom übertragen. Dies führt in diesem Fall zu einer Aufheizung des Gases.

Ein Staubteilchen, das sich mit der Geschwindigkeit Δv relativ zum umgebenden Medium bewegt, wird durch die Wechselwirkung mit ihm abgebremst. Durch Zusammenstöße mit den Gasteilchen wird auf diese Energie übertragen, wodurch sich das Gas erhitzt. Der Energieübertrag bei einer Kollision kann wie oben gezeigt abgeschätzt werden. Der Heizterm ergibt sich damit zu

$$\Lambda^+ = -n \Delta v n_g \pi a^2 k_B(T - T_d) . \quad (2.3)$$

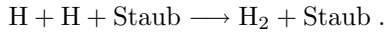
Es existieren zwei Grenzfälle. Bewegen sich die Staubpartikel sehr schnell, dann überwiegt die Heizung des Gases. Ruhen dagegen die Staubkörner im Medium, spielt nur der oben beschriebene Kühlterm eine Rolle. Daher müssen die Effekte geeignet gemittelt werden, wobei auf die Gewichtung der Geschwindigkeiten geachtet werden muß. Der effektive Heiz-, respektive Kühlterm ist dann durch

$$\Lambda_d = \frac{v_{th} \Lambda^- + \Delta v \Lambda^+}{\Delta v + v_{th}} = n_g n \pi a^2 k_B(T - T_d) \frac{v_{th}^2 - \Delta v^2}{\Delta v + v_{th}} = n_g n \pi a^2 k_B(T - T_d) (v_{th} - \Delta v) \quad (2.4)$$

gegeben.

2.2 Molekülbildung auf Stauboberflächen

Die Anwesenheit von Staub verändert die chemische Zusammensetzung des Gases. Auf der Oberfläche der Staubpartikel können sich Gasatome anlagern und sich zu Molekülen verbinden. Der Staub spielt dabei die Rolle eines Katalysators, der diesen Prozeß begünstigt.



Hollenbach und McKee (1979)^[20] geben für den dazugehörigen Ratenkoeffizienten

$$k_R(T) = \frac{n_d}{n_p} \pi a^2 \langle Sv \rangle f_a \quad (2.5)$$

an. Dabei ist f_a die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Wasserstoffatom an einer Störstelle auf der Stauboberfläche haften bleibt. Sie ist abhängig von der Staubtemperatur T_d und kann für niedrige Temperaturen abgeschätzt werden zu

$$f_a \approx 1 . \quad (2.6)$$

$\langle Sv \rangle$ ist eine Mittelung des Haftkoeffizienten S über die Geschwindigkeitsverteilung der auf die Oberfläche auftreffenden Wasserstoffatome. Legt man eine Maxwellverteilung zugrunde, erhält man für den Mittelwert

$$\langle Sv \rangle = \frac{v_{th}}{1 + 4 \times 10^{-2} \left(\frac{T+T_d}{\text{K}}\right)^{1/2} + 2 \times 10^{-3} \left(\frac{T}{\text{K}}\right) + 8 \times 10^{-6} \left(\frac{T}{\text{K}}\right)^2} . \quad (2.7)$$

2.3 Elektrische Ladung auf Staubpartikeln

Befindet sich Staub in einem ionisierten Medium, werden die Staubpartikel durch die Wechselwirkung mit den Teilchen des Plasmas elektrisch aufgeladen. Aufgrund der thermischen Bewegung kommt es zu Kollisionen zwischen den Ionen und den Staubeilchen. Wegen der höheren mittleren Geschwindigkeit der Elektronen, wird ein anfänglich neutrales Staubeilchen häufiger von ihnen getroffen als von Protonen. Es nimmt mit der Zeit eine negative Ladung an, die den Elektronenfluß auf die Partikeloberfläche verringert. Auf der anderen Seite wird der Fluß von Protonen erhöht. Es stellt sich ein dynamisches Gleichgewicht mit einer konstanten Oberflächenladungsdichte ein. Spitzer (1941)^[45] gibt für die Anzahl der Elementarladungen auf einem Staubeilchen mit dem Radius a im Gleichgewicht die Gleichung

$$Z = -2.51 \frac{1}{e^2} a k_B T . \quad (2.8)$$

an. Dabei ist T die Temperatur des Mediums.

Bewegt sich das Staubeilchen relativ zum umgebenden Medium, kommt es zu einer Veränderung der Elektronen- und Protonenflüsse. Dies führt zu einer Abnahme der negativen Ladung auf dem Staubeilchen mit steigender Partikelgeschwindigkeit. Shull (1978)^[37] gibt für die korrigierte Ladung

$$Z = -\zeta \left(\frac{v}{\hat{v}}\right) \frac{1}{e^2} a k_B T \quad (2.9)$$

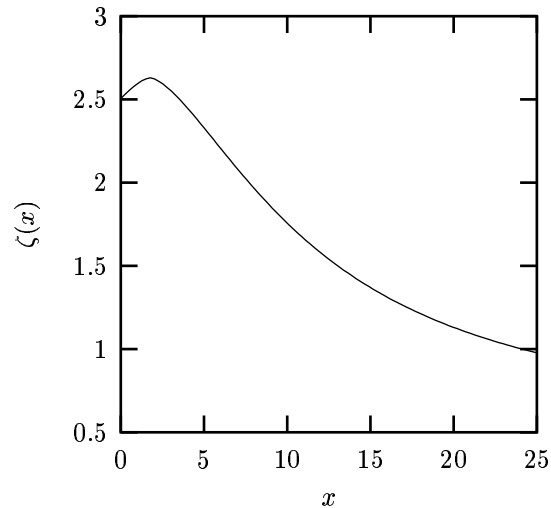


Abbildung 2.1: Der Ladungsparameter ζ als Funktion der auf \hat{v} normierten Geschwindigkeit.

an. Dabei ist

$$\hat{v} = \sqrt{\frac{2k_{\text{B}}T}{m}} \quad (2.10)$$

die wahrscheinlichste Geschwindigkeit innerhalb der Maxwellverteilung. Weil die Gleichung für den Ladungsparameter ζ analytisch nicht auflösbar ist, wird er aus Gründen der Einfachheit im weiteren Verlauf durch folgende Funktion approximiert:

$$\zeta(x) = \frac{2.13}{1 + 0.0264 \cdot |x - 1.75|^{1.55}} + 0.5. \quad (2.11)$$

Dabei wurde das in der Veröffentlichung von Shull (1978)^[37] beschriebene Verhalten ($\zeta(0) = 2.504$, $\zeta(1.75) = 2.63$, $\zeta(\infty) = 0.5$) und die Forderung, daß der Graph durch die Funktion möglichst gut nachgebildet wird, benutzt. Dazu wurde die Funktion so angepaßt, das sie bei $x = 24$ den Wert 1 annimmt. Der auf diese Weise genäherte Ladungsparameter ist in Abbildung 2.1 aufgetragen.

2.4 Beschleunigung der Staubpartikel

Staubpartikel im interstellaren Medium unterliegen der Einwirkung von verschiedenen Kräften, die ihre Geschwindigkeiten beeinflussen. Sie werden durch Gravitations- und Strahlungsfelder beschleunigt oder durch Reibung mit dem umgebenden Gas abgebremst. Tragen die Teilchen eine elektrische Ladung, können sie durch veränderliche Magnetfelder angetrieben werden. Man spricht hier von Betatronbeschleunigung. Im Folgenden werden die Mechanismen genauer beschrieben, die im Rahmen des hydrodynamischen Modells, auf dem diese Arbeit beruht, eine Rolle spielen.

Das Hauptaugenmerk des physikalischen Modells liegt neben der Hydrodynamik auf der Behandlung der Molekülphysik, der Bildung und Zerstörung von Wasserstoffmolekülen. Es liefert keine Informationen über die Magnetfelddichte oder das Strahlungsfeld. Daher werden Betatronbeschleunigung und die Wirkung des Strahlungsdrucks auf die Staubteilchen nicht berücksichtigt. Bei den hohen Schockgeschwindigkeiten, die man bei stellaren Jets beobachten kann, und der relativ großen Entfernung der Bugstoßwelle vom zentralen Protostern, ist auch die Wirkung der Gravitation vernachlässigbar.¹

2.4.1 Direkte Reibung mit dem Gas

Bewegt sich ein Staubteilchen relativ zu dem ihn umgebenden Gas, kollidiert es mit den Gasparkeln und gibt an diese einen Teil seines Impulses ab. Dabei wird es kontinuierlich abgebremst und nähert seine Geschwindigkeit asymptotisch der des Mediums an. Die Distanz, innerhalb der das Staubteilchen auf etwa die Hälfte der Anfangsgeschwindigkeit abgebremst wird, kann wie folgt abgeschätzt werden. Ein sphärisches Teilchen mit dem Radius a und der Masse M bewege sich mit einer Geschwindigkeit v und lege innerhalb einer gewissen Zeit eine Strecke l zurück. Dabei sammelt es die Atome innerhalb des Volumens $\pi a^2 l$ auf. Man kann den Vorgang als inelastischen Stoß zwischen dem Staubteilchen und der Gassäule betrachten. Wählt man die Länge l so, daß sich beide Impulse kompensieren, gilt im Schwerpunktsystem

$$M \frac{v}{2} = \pi a^2 l \rho_g \frac{v}{2}. \quad (2.12)$$

Daraus ergibt sich eine „Halbwertslänge“ von

$$l_{\frac{1}{2}} = \frac{M}{\pi a^2 \rho_g}. \quad (2.13)$$

Sie ist ein Maß für die Längenskala, auf der sich der Abbremsvorgang abspielt.

¹Siehe dazu Suttner (1996).^[47]

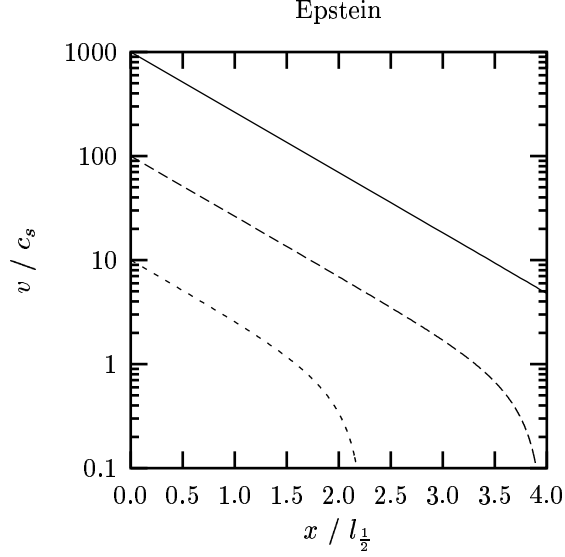


Abbildung 2.2: Die Abbremsung von Staubpartikeln durch direkte Reibung mit dem umgebenden Gas. Die einzelnen Graphen zeigen die Geschwindigkeiten von Staubteilchen mit verschiedenen Anfangsgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von der Entfernung. Für den Plot wurde die Gleichung (2.15) analytisch gelöst.

Die Abbremsung der Staubpartikel wird bei einem hinreichend dichten Medium mit Hilfe des Stokes-Gesetzes quantitativ beschrieben. Bei niedrigen Gasdichten verliert es seine Gültigkeit. Ist das Medium so dünn, daß die mittlere freie Weglänge der Gasteilchen

$$l_{gg} = \frac{m_H}{\rho_g \sigma_{gg}} \quad (2.14)$$

kleiner ist als die Halbwertslänge $l_{\frac{1}{2}}$, muß das Stokes-Gesetz durch eine Beziehung der Form

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{4\pi}{3} \rho_g \frac{a^2}{M} \sqrt{c_s^2 + v^2} v, \quad (2.15)$$

ersetzt werden. Sie wurde von Yorke und Krügel (1977)^[59] angegeben. Dabei ist σ_{gg} der Streuquerschnitt zweier Gaspartikel, v die Geschwindigkeit des Staubpartikels relativ zum umgebenden Medium und c_s die adiabatische Schallgeschwindigkeit

$$c_s = \sqrt{\gamma \frac{\mathcal{R}T}{\mu}}. \quad (2.16)$$

Dabei ist γ der Adiabatenexponent und \mathcal{R} die allgemeine Gaskonstante. Das oben genannte Kriterium für die Anwendbarkeit von Gleichung (2.15), die erstmals von Epstein (1923)^[11] eingeführt wurde, ist in interstellarer Materie stets gut erfüllt. Selbst für extrem hohe Gasdichten², die im astrophysikalischen Kontext auftreten, ergeben sich kritische Staubpartikelradien von mehreren Zentimetern. Dies ist um mehrere Zehnerpotenzen größer, als die Radien von großen Staubpartikeln.

2.4.2 Coulomb-Reibung

Ist ein Staubpartikel geladen, kann es über die Coulombwechselwirkung einen Teil seines Impulses auf Ionen im Medium, in dem es sich bewegt, übertragen. Dabei wird es abgebremst. Der Vorgang kann ähnlich wie bei der Abbremsung von Ionen in Materie abgeschätzt werden. Es werden folgende Annahmen

²Siehe z. B. Yorke et al. (1993).^[56] finden durch numerische Berechnungen protostellarer Scheiben Gasdichten von bis zu $10^{-10} \text{ g cm}^{-3}$ in der Äquatorebene.

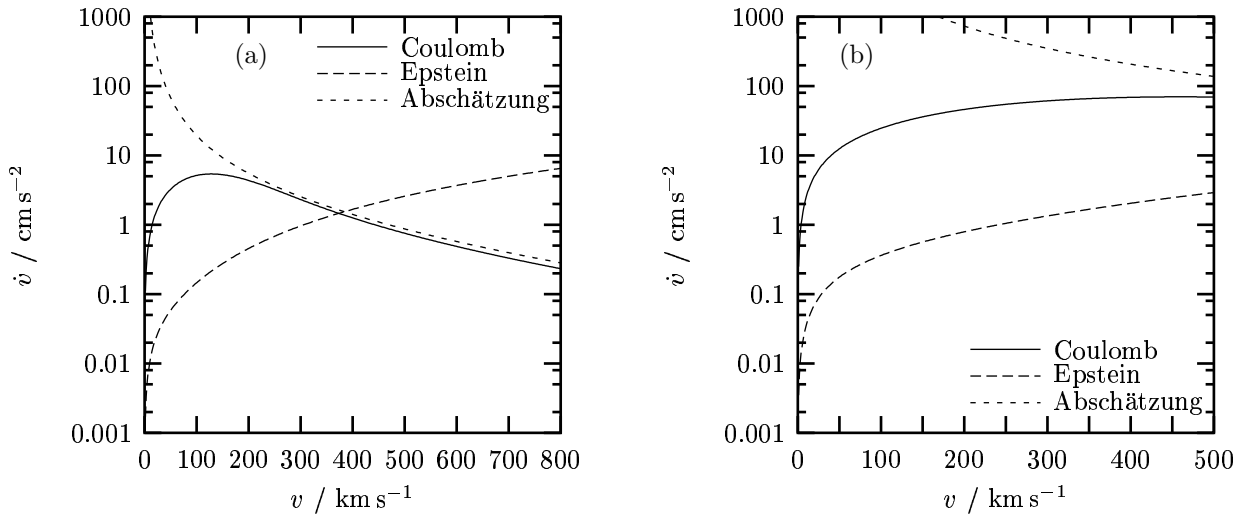


Abbildung 2.3: Vergleich der Beschleunigung, die durch die verschiedenen Kopplungsmechanismen verursacht werden. Die Plots zeigen die Verzögerung von Staubpartikeln mit dem Radius 100 nm und der Dichte 3.3 g cm^{-3} in Abhängigkeit von der Relativgeschwindigkeit v zum umgebenden Medium. Die Kurven wurden für Wasserstoffgas mit unterschiedlichen Parametern berechnet: (a) $\rho_d = 10^{-19} \text{ g cm}^{-1}$, $T = 10^6 \text{ K}$. (b) $\rho_d = 9.2 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-1}$, $T = 1.3 \times 10^7 \text{ K}$. Es wurde angenommen, daß die Medien vollständig ionisiert sind.

zugrunde gelegt. Der Energieverlust, den das Teilchen erleidet, ist kontinuierlich. D. h. bei jedem Stoß wird nur ein kleiner Teil der kinetischen Energie übertragen. Weiterhin erfolgt keine Ablenkung des Staubteilchens und die Ionen im umgebenden Gas werden als ruhend angesehen. Die Zusammenhänge, die diesem Modell zugrunde liegen werden in Abbildung 2.4 verdeutlicht.

Ein Staubpartikel mit der Masse M und der Ladung Ze passiere ein Ion, der Masse m und der Ladung ze , im Abstand s mit der Geschwindigkeit v . Das Teilchen bewege sich auf einer geradlinigen Bahn und übertrage einen Teil seines Impulses auf das Ion, das während des gesamten Vorgangs in Ruhe bleibt. Diese idealisierte Annahme ist gut erfüllt, solange die Wechselwirkungszeit $\tau = s/v$ „kurz“ ist. Da sich aus Gründen der Symmetrie die parallelen Kraftkomponenten aufheben, trägt nur die senkrechte Komponente zur Wechselwirkung bei. Die Impulsänderung, die das Ion erfährt, ist dann

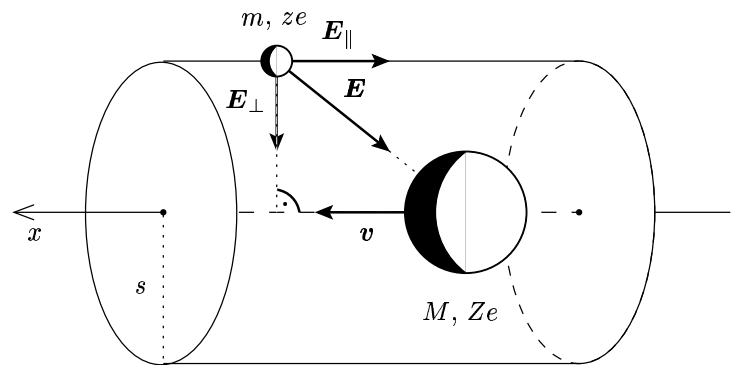


Abbildung 2.4: Die Impulsübertragung von einem geladenen Staubpartikel auf ein Ion in der Umgebung.

$$\Delta p = \int F dt = Ze \int E_{\perp} dt = Ze \int E_{\perp} \frac{dt}{dx} dx = \frac{Ze}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} E_{\perp} dx. \quad (2.17)$$

Das Integral kann mit Hilfe des Gaußschen Satzes berechnet werden. Es ergibt sich:

$$\oint \mathbf{E} \, d\mathbf{A} = 4\pi z e = \int_{-\infty}^{+\infty} E_{\perp} 2\pi s \, dx = 2\pi s \int_{-\infty}^{+\infty} E_{\perp} \, dx . \quad (2.18)$$

Daraus folgt mit Gleichung (2.17)

$$\Delta p = \frac{2Zze^2}{vs} . \quad (2.19)$$

Für den Energieverlust des Staubpartikels ergibt sich somit

$$\Delta E = -\frac{\Delta p^2}{2m} = -\frac{2Z^2z^2e^4}{mv^2s^2} . \quad (2.20)$$

Das Gas sei homogen und habe eine Ionendichte von n_I . Der Beitrag der Ionen in einem Volumenelement dV zum Energieverlust bei der Durchquerung einer Strecke dx ist dann durch

$$dE = -\Delta E n_I dV = -\frac{2Z^2z^2e^4 n_I}{mv^2s^2} 2\pi s \, ds \, dx . \quad (2.21)$$

gegeben. Mit Hilfe der Beziehung $\frac{dE}{dx} = M\dot{v}$ erhält man für die Verzögerung des Staubpartikels

$$\dot{v} = -\frac{4\pi Z^2z^2e^4 n_I}{Mmv^2} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{ds}{s} = -\frac{4\pi Z^2z^2e^4 n_I}{Mmv^2} \ln \frac{s_{\max}}{s_{\min}} . \quad (2.22)$$

Für sehr große oder sehr kleine Stoßparameter versagt das Modell. Dies zeigt sich darin, daß das Integral divergiert, wenn man die Integrationsgrenzen gegen 0 und ∞ gehen läßt. Aus diesem Grund müssen diese vernünftig abgeschätzt werden. Die Idee dabei ist, daß auch eine große Änderung des Quotienten aus den Grenzen $\Lambda = s_{\max}/s_{\min}$ nur zu einer kleinen Veränderung von Gleichung (2.22) führt, da er nur logarithmisch eingeht.

Der Energieübertrag bei einem Stoß ist begrenzt. Die maximale Energieänderung erfolgt bei einem zentralen Stoß. Mit der Annahme $M \gg m$ ergibt sich für die maximale Impulsänderung des Ions $\Delta p_{\max} = 2mv$, und man erhält für den Energieübertrag

$$\Delta E_{\max} = \frac{\Delta p_{\max}^2}{2m} = 2mv^2 = -\frac{2Z^2z^2e^4}{mv^2s_0^2} . \quad (2.23)$$

Für die Untergrenze des Stoßparameters folgt daraus

$$s_0 = \frac{Zze^2}{mv^2} . \quad (2.24)$$

Die Reichweite der Coulombwechselwirkung in einem Plasma wird durch den Abschirmungseffekt anderer geladener Teilchen beschränkt. Cohen et al. (1950)^[5] haben gezeigt, daß die Reichweite nicht durch den mittleren Abstand zweier Staubpartikel abgeschätzt werden kann. Die obere Integrationsgrenze ist durch die Debye-Hückel-Abschirmlänge der freien Elektronen

$$d = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi e^2 n_e}} \quad (2.25)$$

gegeben.

	$\varrho_0 / \text{g cm}^{-3}$	U_0 / eV	M_K / u	Z_K / e	K
Silikat	3.3	5.70	23	11	0.10
Graphit	2.2	4.00	12	6	0.65
SiC	3.1	6.30	20	10	0.30
Eis	1.0	0.53	18	10	0.10
Eisen	7.9	4.10	56	26	0.35

Tabelle 1: Parameter der Materialien, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden. Die Werte sind aus der Publikation von Tielens et al. (1994)^[52] entnommen.

Man erhält schließlich für die Beschleunigung

$$\dot{v} = -\frac{4\pi Z^2 z^2 e^4 n_I}{M m v^2} \ln \tilde{\Lambda}, \quad (2.26)$$

mit den Grenzen

$$\ln \tilde{\Lambda} = \ln \frac{d}{s_0} = \frac{1}{2} \ln \frac{m^2 v^4 k_B T}{4\pi Z^2 z^2 e^6 n_e}. \quad (2.27)$$

Eine genauere Rechnung führt zu dem Ergebnis, das von Shull (1977, 1978)^[36, 37] angegeben wird:

$$\dot{v} = \frac{2\pi Z^2 z^2 e^4 n}{M k_B T} G\left(\frac{v}{\tilde{v}}\right) \ln \Lambda, \quad (2.28)$$

mit

$$G(x) = \frac{1}{2x^2} \left(\operatorname{erf}(x) - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2) \right). \quad (2.29)$$

Die Integrationsgrenzen werden wie oben abgeschätzt. Lediglich die kinetische Energie der Ionen wird durch $\frac{3}{2}k_B T$ ersetzt. Damit erhält man

$$\ln \Lambda = \ln \frac{d}{s_0} = \frac{1}{2} \ln \frac{9k_B^3 T^3}{4\pi Z^2 z^2 e^6 n_e}. \quad (2.30)$$

Abbildung 2.3 verdeutlicht, unter welchen Bedingungen die diskutierten Kopplungsmechanismen wichtig sind. Die direkte Reibung mit dem Medium ist vor allem bei hohen Relativgeschwindigkeiten stark. In ionisiertem Gas wird die Kopplung bei niedrigen Geschwindigkeiten von der Coulombwechselwirkung beherrscht. Bei niedrigeren Temperaturen wird diese Dominanz stärker. Die Kopplung von schnellen Staubpartikeln wird gut durch die Abschätzung (2.26) beschrieben. Sie versagt aber bei niedrigen Geschwindigkeiten und hohen Temperaturen.

2.5 Kontinuierliche Staubzerstörungsprozesse

Neben den kinematischen Auswirkungen kann die Wechselwirkung zwischen den Staubpartikeln mit den Gasteilchen zu erosiven Prozessen auf den Stauboberflächen führen. Insbesondere durch Kollisionen mit hochenergetischen Ionen kann es zur Abtragung von Oberflächenmaterial kommen. Man spricht in diesem Zusammenhang von Sputtering. Aufgrund der Coulombwechselwirkung zwischen den geladenen Gaspartikeln mit den positiven Atomrümpfen der Staubmaterie ist der Wirkungsquerschnitt für diesen Prozeß groß. Dagegen kann der Einfluß der Zusammenstöße mit neutralen Gasatomen vernachlässigt werden.

Gerät Gas in eine Stoßfront, wird dieses komprimiert und erhitzt. Ebenso wird die Teilchendichte des Staubes, den das Gas mit sich führt, erhöht. Dies geschieht aufgrund der großen Masse der Staubpartikel –

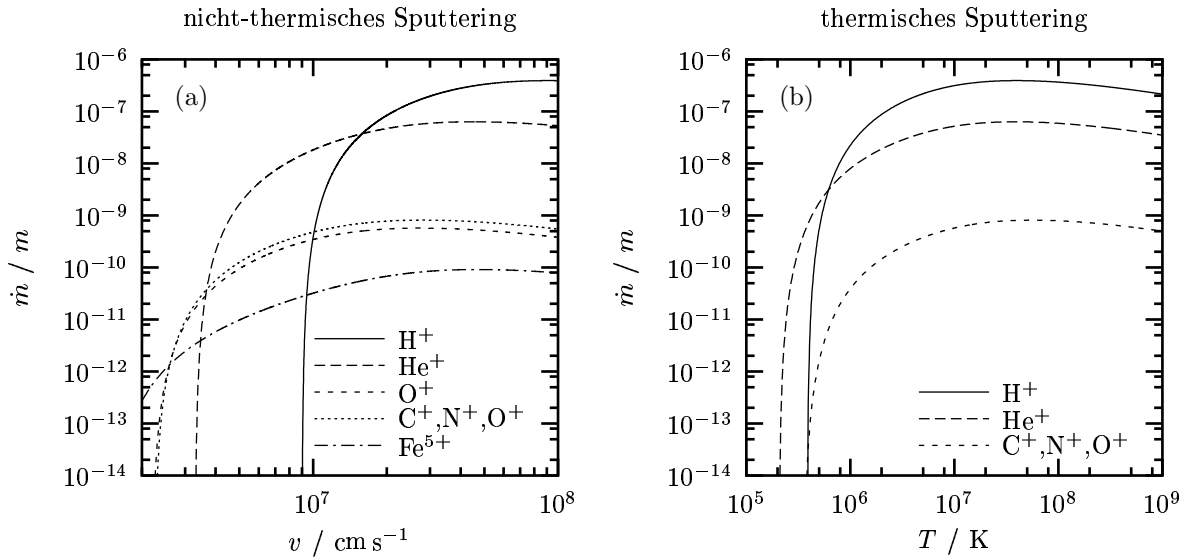


Abbildung 2.5: Die Plots stellen die Massenverlustraten durch verschiedene Sputteringmechanismen dar. Sie sind auf die Massen der Staubteilchen bezogen. Die Graphen zeigen die Verluste, die durch verschiedene Ionensorten verursacht werden. Für deren Berechnung wurden Targetteilchen aus Silikat mit dem Radius $a = 10^{-6} \text{ cm}$ zugrunde gelegt. Die Gasdichte beträgt jeweils $\rho_g = 2.32 \times 10^{-19} \text{ g cm}^{-3}$. Die Abbildungen zeigen (a) den Masseverlust durch nicht-thermisches Sputtering in Abhängigkeit von der Relativgeschwindigkeit zum Gas und (b) den Masseverlust durch thermisches Sputtering als Funktion der Temperatur.

im Vergleich zur Masse der Gasteilchen – verzögert. Gelangen die Teilchen in das Gebiet des verdichteten Gases werden diese durch die Reibung mit den Gasparkeln abgebremst. Während der Dauer dieser Beschleunigungsphase, sind Zusammenstöße mit Gasionen möglich. Sind Magnetfelder vorhanden, werden diese zusammen mit dem Gas komprimiert. Die Staubteilchen, die in das Gebiet nach der Stoßfront eindringen, „sehen“ ein veränderliches B -Feld und erfahren aufgrund der elektrischen Ladung, die sie mit sich tragen, eine Beschleunigung. Dies führt zu einer Bewegung relativ zum umgebenden Gas. Vor allem in radiativen Stoßwellen mit Schockgeschwindigkeiten von $v_s < 200 \text{ km s}^{-1}$ spielt dieser Effekt eine wichtige Rolle.³ Die Abtragung von Staubmaterial aufgrund dieser Prozesse wird als *nicht-thermisches Sputtering* bezeichnet.

Neben den eben besprochenen Mechanismen kann auch die thermische Bewegung der Gasteilchen zu Zusammenstößen mit den Staubkörnern und damit zum einem Masseverlust führen. In diesem Zusammenhang spricht man von *thermischem Sputtering*.

Nach Sigmund (1969)^[39] kann man Sputtering als lineare Abfolge einzelner Zweikörperstöße zwischen den einschlagenden Ionen und den Atomen des Targetmaterials beschreiben. Bei diesem Prozeß wird ein Teil des Impulses des Projektils auf die Targetatome übertragen. Dabei nehmen einige Atome genügend Energie auf, daß sie die Oberflächenbindungskräfte überwinden können und von dem Staubpartikel abgelöst werden. Die mittlere Anzahl der Atome, die pro einfallendem Ion herausgeschlagen wird, wird durch die statistische Variable $Y(E)$ beschrieben. Sie hängt von der kinetischen Energie E des Ions ab. Tielens et al. (1994)^[52] geben dafür die empirische Formel

$$Y(E) = \frac{3.56}{U_0/\text{eV}} \frac{M_I}{M_I + M_K} \frac{Z_I Z_K}{\sqrt{Z_I^{2/3} + Z_K^{2/3}}} \alpha \frac{R_p}{R} s_n(\epsilon_{1.2}) \left(1 - \left(\frac{E_0}{E}\right)^{2/3}\right) \left(1 - \frac{E_0}{E}\right)^2 \quad (2.31)$$

³Siehe dazu Tielens et al. (1994).^[52]

an. Sie basiert auf einer universellen Relation, die von Bohdansky (1984)^[4] aufgestellt wurde. Sie beschreibt sowohl das Sputtering von leichten als auch von schweren Ionen. M_I und Z_I sind die Masse und die Ladungszahl des einfallenden Ions, M_K und Z_K sind die Kernmasse bzw. die Kernladungszahl, und U_0 ist die Oberflächenbindungsenergie des Targetmaterials. Der Parameter α aus Gleichung (2.31) ist eine dimensionslose Funktion des Massenverhältnisses von einfallendem Ion und der Atommasse des Targetmaterials.

$$\alpha = \begin{cases} 0.2 & \text{für } M_K/M_I < 0.5 \\ 0.3 (M_K/M_I)^{2/3} & \text{für } M_K/M_I \geq 0.5 \end{cases} \quad (2.32)$$

Die Schwellenenergie für Sputtering ist E_0 . Sie wird von Bohdansky et al. (1980)^[3] durch folgende Beziehung angegeben.

$$E_0 = \begin{cases} U_0/(g(1-g)) & \text{für } M_I/M_K \leq 0.3 \\ 8U_0 (M_I/M_K)^{1/3} & \text{für } M_I/M_K > 0.3 \end{cases}, \quad (2.33)$$

dabei ist der Parameter g durch

$$g = \frac{4M_I M_K}{(M_I + M_K)^2} \quad (2.34)$$

gegeben. $s_n(\epsilon_{12})$ ist eine universelle Funktion, die proportional zum elastischen, nuklearen Stopping-Querschnitt $S_N(E)$ ist. Detaillierte numerische und analytische Studien von Matsunami et al. (1980)^[31] zeigen, daß sie durch

$$s_n(\epsilon_{12}) = \frac{3.441 \sqrt{\epsilon_{12}} \ln(\epsilon_{12} + 2.718)}{1 + 6.35 \sqrt{\epsilon_{12}} + \epsilon_{12} (-1.708 + 6.882 \sqrt{\epsilon_{12}})} \quad (2.35)$$

approximiert werden kann. Dabei ist ϵ_{12} durch die Beziehung

$$\epsilon_{12} = \frac{M_K}{M_I + M_K} \frac{a}{Z_I Z_K e^2} E \quad (2.36)$$

gegeben. a ist die Reichweite der Wechselwirkung zwischen dem einfallenden Ion und dem Atomkern. Sie wird durch

$$a = 0.885 a_0 \left(Z_I^{2/3} + Z_K^{2/3} \right)^{-1/2}, \quad (2.37)$$

mit dem Bohrradius $a_0 = 0.528 \text{ \AA}$, abgeschätzt.

In dem Sputteringmodell werden Oberflächeneffekte vernachlässigt. Diese Vereinfachung ist für schwere Ionen eine brauchbare Approximation. Um zu verhindern daß für leichte Teilchen eine unrealistisch hohe Anzahl von Streuprozessen errechnet wird, ist eine Korrektur nötig, die die mittlere Eindringtiefe der Ionen R_p berücksichtigt. Bohdansky (1984)^[4] gibt als Näherung den Faktor

$$\frac{R_p}{R} = \left(K \frac{M_2}{M_1} + 1 \right)^{-1} \quad (2.38)$$

an. Dabei ist K ein Parameter, der durch das Targetmaterial bestimmt wird. Zahlenwerte von K für verschiedene Staubmaterialien, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden, sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Durch den Sputteringprozeß wird kontinuierlich Material von der Oberfläche eines Staubpartikels abgetragen. Der Masseverlust eines Staubteilchens in einem vorgegebenen Zeitintervall ergibt sich aus der

Anzahl der Zusammenstöße mit den Gasionen, der Anzahl der pro Kollision durchschnittlich herausgeschlagenen Staubatome und deren mittleren Masse. Im Falle von nicht-thermischem Sputtering ergibt sich für eine Relativgeschwindigkeit von v_r eine Massenverlustrate von

$$\dot{m}_{ns} = -n_I \pi a^2 v_r Y(v_r) \bar{m}_d . \quad (2.39)$$

Dabei ist a der Radius des Staubpartikels und \bar{m}_d die mittlere Masse eines Staubatoms.

Um den Masseverlust für thermisches Sputtering zu bestimmen, muß die Gleichung (2.39) über die Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung gemittelt werden.

$$\dot{m}_{ts} = -n_I \pi a^2 \langle v_r Y(v_r) \rangle \bar{m}_d . \quad (2.40)$$

Als Näherung wird für die weiteren Rechnungen die thermische Geschwindigkeit v_{th} als mittlere Geschwindigkeit in Gleichung (2.39) eingesetzt.

In Abbildung 2.5 sind die Massenverlustraten, die durch thermisches und nicht-thermisches Sputtering verursacht werden, aufgetragen. Um den Einfluß der verschiedenen Ionensorten zu berücksichtigen, wurden die kosmischen Elementhäufigkeiten⁴ zugrunde gelegt.

Aufgrund des hohen Aufkommens von Wasserstoff wird nicht-thermisches Sputtering durch H^+ -Ionen dominiert. Wegen der größeren Masse der He^+ -Ionen können sie effektiver Material abtragen. Dies hat eine im Vergleich zum Wasserstoff niedrigere Schwellengeschwindigkeit zur Folge. Durch die niedrigere Konzentration ist He^+ -Sputtering nur unterhalb der Grenzggeschwindigkeit für Wasserstoffionen wichtig, die bei etwa $v = 100 \text{ km s}^{-1}$ liegt. Der Gesamteffekt durch das Sputtering der Ionen aus der CNO-Gruppe ist trotz der großen Ionenmasse geringer als das He^+ -Sputtering und dominiert erst unterhalb der He^+ -Schwelle von etwa $v = 35 \text{ km s}^{-1}$. Obwohl Sputtering durch Fe^{5+} -Ionen aufgrund der hohen Masse und Ladung äußerst effektiv ist, kann es wegen der geringen Konzentration im Vergleich mit den anderen Ionen vernachlässigt werden.

Im Falle von thermischem Sputtering ist dieses Verhalten noch deutlicher ausgeprägt. Der Effekt, der durch schwere Ionen verursacht wird, ist aufgrund der im Vergleich zu leichteren Ionen geringeren thermischen Geschwindigkeiten viel kleiner als bei nicht-thermischem Sputtering. Ausschlaggebend ist allein Sputtering durch H^+ -Ionen. Der Einfluß der He^+ -Ionen unterhalb der Schwelle für H^+ -Sputtering ist klein. Andere Ionen spielen keine Rolle.

2.6 Staubpartikelkollisionen

2.6.1 Kraterbildung

Die physikalischen Vorgänge, die sich bei der Kollision zweier Staubteilchen abspielen, sind sehr komplex. Es entstehen Schockwellen, die sich in den Staubkörnern ausbreiten. Das Staubmaterial wird verdichtet, was in bestimmten Regionen des Partikels zu Phasenübergängen führen kann. In bestimmten Bereichen des Partikels kann das Material schmelzen oder verdampfen. Durch den Zusammenstoß entstehen im Target Scherkräfte, wodurch Teile des Materials in Form kleiner Fragmente herausgeschleudert werden können. Man spricht in diesem Zusammenhang von *Shattering*. Diese Vorgänge sorgen dafür, daß auf dem Target durch den Materieverlust ein Krater entsteht. Bei sehr hohen Kollisionsenergien kann das Partikel komplett zerschlagen oder sogar vollständig vaporisiert werden. Diese Prozesse werden von Tielens et al. (1994)^[52] und Jones et al. (1996)^[23] im Detail beschrieben.

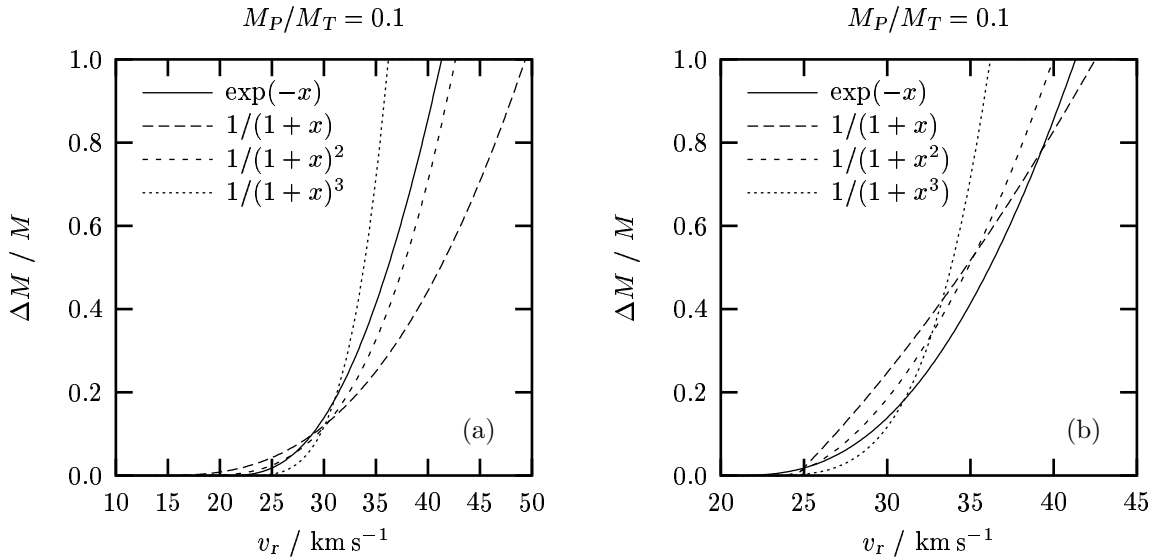


Abbildung 2.6: (a),(b) Der gesamte Masseverlust, der durch die Kraterbildung bei einer Partikelkollision verursacht wird, für verschiedene Verteilungsfunktionen $f(x)$ in Abhängigkeit von der Relativgeschwindigkeit. Die Kurven wurden für eine kritische Energiedichte von $\epsilon_k = 3.6 \times 10^{11} \text{ erg cm}^{-3}$ und für ein Masseverhältnis von Projektil zu Target von $M_P/M_T = 0.1$ berechnet.

2.6.2 Abgetragene Masse

In einer frühen Studien zu Staubpartikelkollisionen gibt Barlow (1978)^[1] als Abschätzung für die Schwellengeschwindigkeit, bei der totale Vaporisation auftritt,

$$v_k = (M_P + M_T) \sqrt{\frac{2\epsilon_k}{M_P M_T}} \quad (2.41)$$

an. Dabei sind M_P und M_T die Massen von Projektil- und Targetteilchen. Um zu dem Ergebnis zu kommen wurde angenommen, daß sich die kinetische Energie der Relativbewegung $E_{kin} = \frac{v_r^2}{2} \frac{M_P M_T}{M_P + M_T}$ gleichmäßig auf beide Stoßpartner verteilt und in Wärme umgewandelt wird. Die Staubteilchen werden vaporisiert, wenn die Energiedichte $E_{kin}/(M_P + M_T)$ den kritischen Wert ϵ_k , bei dem das Staubmaterial verdampft, übersteigt.

Um die Vaporisation und Fragmentation von Staubmaterial bei Partikelkollisionen quantitativ zu beschreiben, ist es nötig, die abgetragene Masse abzuschätzen. Die Abschätzung, die bei den numerischen Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurde, wird im Folgenden entwickelt.

Übersteigt die Relativgeschwindigkeit diese Grenze, werden die Staubpartikel teilweise oder ganz zerstört. Mit Hilfe eines Modells kann man die Masse, die bei diesem Prozeß abgetragen wird, abschätzen. Es wird angenommen, daß der Zusammenstoß zwischen Projektil und Target zentral und vollständig inelastisch erfolgt. Beide Partner verschmelzen zu einem einzigen Teilchen der Masse M . Die Energie, die das Reaktionsprodukt dabei aufnimmt, ist gleich der gesamten kinetischen Energie im Schwerpunktsystem.

$$M = M_P + M_T, \quad (2.42)$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{M_P M_T}{M_P + M_T} v_r^2. \quad (2.43)$$

⁴Siehe Hdb. Physik (1958).^[12]

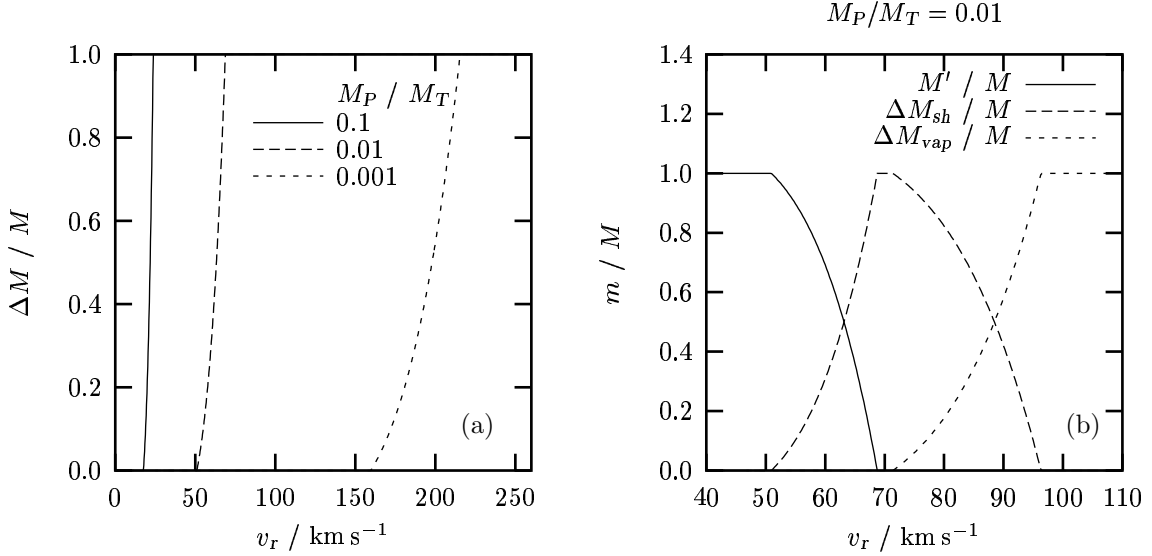


Abbildung 2.7: In beiden Plots wurden die Kurven für eine Verteilungsfunktion $f(x) = 1/(1+x^3)$ und für eine kritische Energiedichte, die zur Vaporisation des Staubmaterials führt, von $\epsilon_{vap} = 3.6 \times 10^{11} \text{ erg cm}^{-3}$ berechnet. (a) Der Masseverlust durch Cratering und Shattering als Funktion der Kollisionsgeschwindigkeit für verschiedene Masseverhältnisse M_P/M_T . (b) Das Verhältnis von vaporisierter Masse ΔM_{vap} , fragmentierter Masse ΔM_{sh} und Restmasse M' des Staubpartikels zur Gesamtmasse $M = M_P + M_T$ bei einem Masseverhältnis von $M_P/M_T = 0.01$ in Abhängigkeit von der Relativgeschwindigkeit.

Die thermalisierte Energie ist nicht homogen über das Produktteilchen verteilt. Reale Staubpartikel besitzen unterschiedliche Gestalten. Um die Verteilung der Energie über das entstehende Teilchen zu beschreiben, wird daher eine symmetrische Form gewählt, die dies möglichst einfach macht. Wie in Abbildung 2.8 gezeigt, wird das Produktteilchen als Halbkugel betrachtet, in dessen Zentrum der Einschlagspunkt liegt. Die spezifische Energie nimmt mit dem Abstand r vom Einschlagspunkt ab. Die Energieverteilung wird durch folgende Gleichung beschrieben:

$$\epsilon(r) = \epsilon_0 f\left(\frac{r}{r_0}\right). \quad (2.44)$$

Dabei ist $f(x)$ eine Funktion, die an experimentelle Befunde angepaßt werden kann. Sie sollte wie eine Potenz- oder Exponentialfunktion mit dem Radius abfallen und für $r = 0$ muß gelten $f(0) = 1$.

Der Bezugsradius r_0 ist über die Masse des Staubteilchens definiert:

$$M = \frac{2\pi}{3} r_0^3 \varrho_0. \quad (2.45)$$

Dabei ist die Massendichte des Staubmaterials durch ϱ_0 gegeben. Für die Einschlagsenergie gilt

$$E = \int_M \epsilon dM = 2\pi \varrho_0 \int_0^{r_0} \epsilon(r) r^2 dr. \quad (2.46)$$

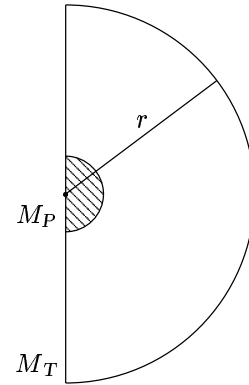


Abbildung 2.8: Die idealisierte Geometrie des Produktteilchens, das aus der Kollision zweier Partikel mit den Massen M_P und M_T entsteht.

Durch die Substitution $x = r/r_0$ erhält man die Beziehung

$$E = 2\pi r_0^3 \rho_0 \epsilon_0 \int_0^1 f(x) x^2 dx = 3M \epsilon_0 \xi . \quad (2.47)$$

Dabei ist $\xi = \int_0^1 f(x) x^2 dx$ ein Geometriefaktor von der Größenordnung 1, der durch die zugrunde gelegte Verteilung der spezifischen Energie $f(x)$ bestimmt wird. Über obige Beziehung wird nun ϵ_0 definiert:

$$\epsilon_0 = \frac{1}{3\xi} \frac{E}{M} . \quad (2.48)$$

Es existiert eine kritische spezifische Energie ϵ_k , ab der das Staubmaterial abgetragen wird. Dazu kann man nun einen Radius r_k bestimmen, innerhalb dessen die spezifische Energie des Materials diesen Grenzwert überschreitet:

$$r_k = r_0 f^{-1} \left(\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \right) . \quad (2.49)$$

Aus dem dazugehörigen Volumen kann man die Masse des vaporisierten Materials ΔM abschätzen.

$$\frac{\Delta M}{M} = \left[f^{-1} \left(\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \right) \right]^3 . \quad (2.50)$$

Für $\Delta M = M$ erhält man die untere Grenze für totale Zerstörung des Partikels:

$$\frac{E}{M} = \frac{3\xi\epsilon_k}{f(1)} . \quad (2.51)$$

Die Annahme, daß sich die thermalisierte Energie gleichmäßig auf das Produktteilchen verteilt ($f(x) = \text{const}$), führt zu einem Ergebnis, das dem von Gleichung (2.41) entspricht.

Bei einem nicht-zentralen Stoß muß die Abhängigkeit vom Stoßparameter s berücksichtigt werden. Wie in Abbildung 2.9 gezeigt, wirkt nur die senkrechte Geschwindigkeitskomponente v_{rad} . Ist v_r die relative Geschwindigkeit beider Teilchen, dann besteht folgender Zusammenhang mit dem Stoßparameter:

$$v_{rad} = v_r \cos \theta = v_r \sqrt{1 - \frac{s^2}{a^2}} . \quad (2.52)$$

Dabei ist $a = a_P + a_T$ die Summe aus den Radien der Stoßpartner.

Existiert eine Schwellengeschwindigkeit v_k , bei der bei einem zentralen Stoß eine teilweise Vaporisation des Staubmaterials auftritt, dann gibt es einen dazugehörigen maximalen Stoßparameter \hat{s} . Bewegen sich die Stoßpartner mit einer Geschwindigkeit v_r relativ zueinander, muß bei einer Kollision der Stoßparameter kleiner als dieser kritische Wert sein, um eine Reaktion zu erzielen. Zwischen \hat{s} und der Schwellengeschwindigkeit v_k ergibt sich der Zusammenhang

$$v_k = v_r \cos \hat{\theta} = v_r \sqrt{1 - \frac{\hat{s}^2}{a^2}} . \quad (2.53)$$

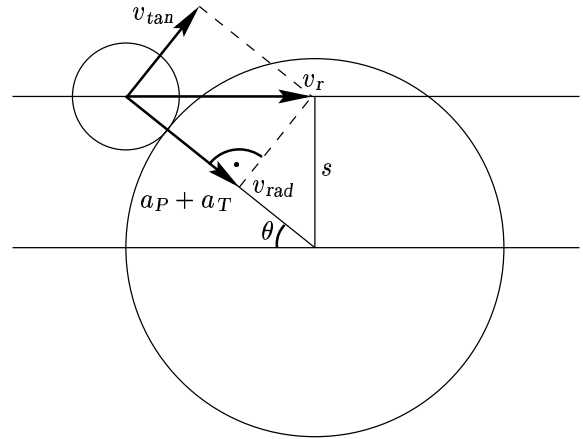


Abbildung 2.9: Der geometrische Streuquerschnitt für den Stoß zweier sphärischer Teilchen.

Ist v_r die Relativgeschwindigkeit von Projektil und Target, dann gilt für die bei der Kollision thermalisierte Energie $E \propto v_r^2$. Für die dazugehörige kritische Energie gilt analog

$$E_k = E \cos^2 \hat{\theta} = E \left(1 - \frac{\hat{s}^2}{a^2} \right) . \quad (2.54)$$

Es ergibt sich

$$\hat{s} = a \sin \hat{\theta} = a \sqrt{1 - \min \left(1, \frac{E_k}{E} \right)} \quad (2.55)$$

als Obergrenze für den Stoßparameter. Man erhält damit für den Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \sigma &= \pi \hat{s}^2 \\ &= \pi a^2 \max \left(0, 1 - \frac{E_k}{E} \right) \\ &= \pi a^2 \max \left(0, 1 - \frac{v_k^2}{v_r^2} \right) . \end{aligned} \quad (2.56)$$

Die abgetragene Masse in Abhängigkeit vom Stoßparameter ist

$$\Delta M(s) = M \left[f^{-1} \left(\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0(s)} \right) \right]^3 , \quad (2.57)$$

mit

$$\epsilon_0(s) = \epsilon_0 \left(1 - \frac{s^2}{a^2} \right) . \quad (2.58)$$

Die bei einer Kollision abgetragene Masse ergibt sich aus dem Mittel von Gleichung (2.57) über alle Stoßparameter:

$$\begin{aligned} \langle \Delta M \rangle &= \frac{2\pi \int_0^{\hat{s}} \Delta M(s) s \, ds}{2\pi \int_0^{\hat{s}} s \, ds} \\ &= \frac{2M}{\hat{s}^2} \int_0^{\hat{s}} \left[f^{-1} \left(\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \left(1 - \frac{s^2}{a^2} \right)^{-1} \right) \right]^3 s \, ds \\ &= M \frac{\epsilon_k a^2}{\epsilon_0 \hat{s}^2} \int_{\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}}^{\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \left(1 - \frac{\hat{s}^2}{a^2} \right)^{-1}} [f^{-1}(x)]^3 \frac{dx}{x^2} \\ &= M \frac{1}{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_k} - 1} \int_{\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}}^1 [f^{-1}(x)]^3 \frac{dx}{x^2} . \end{aligned} \quad (2.59)$$

Dabei wurde folgende Beziehung für den maximalen Stoßparameter \hat{s} verwendet:

$$\frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\hat{s}^2}{a^2} . \quad (2.60)$$

Die Abbildung (2.6) veranschaulicht die Abhängigkeit des vaporisierten Masseanteils von der Relativgeschwindigkeit für verschiedene Modellfunktionen⁵ $f(x)$. Da es für den Masseverlust in Partikelkollisionen an experimentellen Ergebnissen mangelt, wird für die weiteren Rechnungen die Funktion $f(x) = 1/(1+x^3)$ verwendet. Sie ist numerisch mit wenig Rechenaufwand verbunden. Die ausgewählte Funktion führt auf folgende Beziehung für die abgetragene Masse:

$$\frac{\langle \Delta M \rangle}{M} = \frac{1}{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_k} - 1} \left(\frac{1}{12} + \frac{\epsilon_0^4}{4\epsilon_k^4} - \frac{\epsilon_0^3}{3\epsilon_k^3} \right). \quad (2.61)$$

Um den Anteil der vaporisierten Masse zu berechnen, muß die dafür nötige spezifische Energiedichte ϵ_{vap} abgeschätzt werden. Die Gesamtmasse M eines Staubpartikels, das aus N Atomen besteht, läßt sich durch die mittlere Masse \bar{m}_d seiner Atome darstellen.

$$M = N \bar{m}_d. \quad (2.62)$$

Die gesamte Bindungsenergie E_B kann durch die Oberflächenbindungsenergie U_0 eines einzelnen Staubatoms abgeschätzt werden.

$$E_B = N U_0. \quad (2.63)$$

Um das Staubteilchen komplett zu verdampfen, müssen sukzessive alle Atome von dessen Oberfläche entfernt werden. Für die kritische Energiedichte ergibt sich somit

$$\epsilon_{\text{vap}} = \frac{E_B}{M} = \frac{U_0}{\bar{m}_d}. \quad (2.64)$$

Die Vorgänge innerhalb der Staubpartikel, die zur Fragmentation des Staubmaterials führen, sind sehr komplex und nur schwer durch einfache Modelle zu beschreiben. Durch die Zerschlagung eines Staubteilchens in kleinere Partikel vergrößert sich die gesamte Oberfläche des Staubes. Eine einfache Abschätzung der dafür notwendigen kritischen spezifischen Energie ϵ_{sh} kann man über eine Betrachtung der Änderung der Oberflächenenergie erhalten. Der mittlere Durchmesser eines Staubatoms ist durch

$$\bar{a}_d = \left(\frac{3\bar{m}_d}{4\pi\rho_d} \right)^{1/3} \quad (2.65)$$

gegeben. Die gesamte Oberflächenenergie eines Flächenstücks A errechnet sich aus der Oberflächenbindungsenergie aller Atome, die sich auf ihr befinden.

$$E(A) = N(A) U_0 = \frac{A}{\pi\bar{a}_d^2} U_0 = \left(\frac{4\pi\rho_d}{3\bar{m}_d} \right)^{2/3} \frac{U_0}{\pi} A. \quad (2.66)$$

Wird ein sphärisches Staubteilchen mit dem Radius a in kleinere Fragmente zerschlagen, kann der Wert von ϵ_{sh} über die Änderung der Gesamtoberfläche $\Delta A = A - A_0$ abgeschätzt werden:

$$\epsilon_{sh} = \frac{E(A) - E(A_0)}{M} = \left(\frac{4\pi\rho_d}{3\bar{m}_d} \right)^{2/3} \frac{3U_0\Delta A}{4\pi^2\rho_d a^3} = \frac{3U_0}{\rho_d^{1/3}(6\pi^2\bar{m}_d)^{2/3}} \frac{\Delta A}{a^3}. \quad (2.67)$$

Dabei ist A die Oberfläche des ursprünglichen Teilchens und A_0 die gesamte Oberfläche aller Fragmente. Um die Vergrößerung der Oberfläche zu berechnen, wird angenommen, daß das Teilchen in kleinere sphärische Staubteilchen mit dem Radius a_0 zerschlagen wird. Wegen der Massenerhaltung gilt

$$a^3 = N a_0^3. \quad (2.68)$$

⁵Beispiele für die Ableitung der abgetragenen Masse aus der Verteilungsfunktion $f(x)$ sind in Anhang B angegeben.

Damit folgt für die Änderung der Oberfläche

$$\frac{\Delta A}{a^3} = \frac{N 4\pi a_0^2 - 4\pi a^2}{a^3} = \frac{4\pi}{a^3} \left(\left(\frac{a}{a_0} \right)^3 a_0^2 - a^2 \right) = 4\pi \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a} \right). \quad (2.69)$$

Durch die Annahme, daß der ursprüngliche Radius a viel größer als der Radius a_0 der entstehenden Fragmente ist, ergibt sich

$$\frac{\Delta A}{a^3} = 4\pi \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{a_0} - \frac{1}{a} \right) = \frac{4\pi}{a_0}. \quad (2.70)$$

Damit folgt für Gleichung (2.67)

$$\epsilon_{sh} = \frac{3 U_0}{\varrho_d^{1/3} (6\pi^2 \bar{m}_d)^{2/3}} \frac{4\pi}{a_0} = \frac{U_0}{a_0} \left(\frac{48}{\pi \varrho_d \bar{m}_d^2} \right)^{1/3} = \frac{4U_0}{(m_0 \bar{m}_d^2)^{1/3}}. \quad (2.71)$$

Dabei ist m_0 die Masse der Staubfragmente. Um in den numerischen Rechnungen ϵ_{sh} abzuschätzen, wird angenommen, daß m_0 der Masse der kleinsten vorkommenden Staubpartikel entspricht.

Die Abbildung 2.7(a) zeigt die durch Kraterbildung abgetragene Masse in einer Partikelkollision als Funktion der Relativgeschwindigkeit bei unterschiedlichen Massenverhältnissen der beiden Stoßpartner. Bei niedrigen Geschwindigkeiten tragen nur Kollisionen vergleichbar großer Stoßpartner zur Zerstörung der Partikel bei, da bei Massenverhältnissen nahe eins die meiste Energie thermalisiert wird. Wechselwirkungen von Teilchen mit sehr unterschiedlichen Massen werden erst bei vergleichsweise hohen Stoßgeschwindigkeiten wichtig. Bewegt sich ein Ensemble aus verschiedenen großen Staubpartikeln in einem gasförmigen Medium, nehmen die kleinen Teilchen sehr schnell die Gasgeschwindigkeit an, während die großen Teilchen sehr träge auf das Gas reagieren. Hohe Relativgeschwindigkeiten können sich also nur zwischen Partikeln stark unterschiedlicher Masse ausbilden. Dies legt nahe, daß zur Staubzerstörung in Partikelkollisionen hauptsächlich die Reaktionen zwischen unterschiedlich großen Teilchen eine Rolle spielen.

Gemäß den Abschätzungen für die kritischen Energiedichten (2.64) und (2.71) zeigt Abbildung 2.7(b) die relativen Anteile von vaporisierter Masse, fragmentierter Masse und der verbleibenden Restmasse. Zunächst setzt die Fragmentation ein und führt bei steigender Geschwindigkeit schließlich zur kompletten Zerstörung der Staubpartikel. Erst bei höheren Relativgeschwindigkeiten tritt Vaporisation auf.

3 Staubmodell ohne Ortsauflösung

3.1 Staubdynamik

Die Dynamik einer Staubverteilung wird durch die sogenannte *Smoluchowski*-Gleichung beschrieben. Ihre Form wird im Folgenden entwickelt.

Ein Ensemble aus verschiedenen großen Staubteilchen, das sich relativ zu dem es umgebenden Medium bewegt, wird durch die in den vorherigen Kapiteln beschriebenen Prozesse beeinflusst. Die Partikel werden gemäß ihrer Größe von dem Gas unterschiedlich stark beschleunigt. Durch die Wechselwirkung mit Ionen und anderen Teilchen verändern sie ihre Masse oder werden zum Teil in kleinere Fragmente zerschlagen. Die Verteilung der Staubpartikel kann durch eine Verteilungsfunktion beschrieben werden. Unter der Annahme, daß alle Variablen, wie Gastemperatur etc., an jedem Ort den gleichen Wert besitzen, kann diese Verteilung durch zwei Parameter charakterisiert werden, die Masse m und die Geschwindigkeit v der Staubteilchen. Die Teilchendichte für ein bestimmtes Geschwindigkeits- und Größenintervall wird durch Integration über die Verteilungsfunktion $D(m, v)$ berechnet.

$$n = \int_{v_1}^{v_2} \int_{m_1}^{m_2} D(m, v) dm dv . \quad (3.1)$$

Die Änderung der Staubverteilung geschieht teilweise durch kontinuierliche Prozesse, wie Beschleunigung \dot{v} und gleichmäßige Abtragung von Oberflächenmaterial \dot{m} . Da diese Vorgänge die Teilchenzahl nicht verändern, können sie durch eine Kontinuitätsgleichung beschrieben werden.

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial(D \dot{m})}{\partial m} + \frac{\partial(D \dot{v})}{\partial v} = \sum_i \left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_i . \quad (3.2)$$

Dabei sind die Massenverlustrate und die Beschleunigung der Staubpartikel Funktionen ihrer Masse und Geschwindigkeit.

$$\dot{m} = \dot{m}(m, v) , \quad (3.3)$$

$$\dot{v} = \dot{v}(m, v) . \quad (3.4)$$

Der kontinuierliche Masseverlust der Staubpartikel wird vom thermischen und nicht-thermischen Sputtering der Gasionen verursacht.

$$\dot{m} = \dot{m}_{ts} + \dot{m}_{ns} . \quad (3.5)$$

Die Beschleunigung erfolgt durch direkte Kollisionen mit den Gasteilchen und durch die Wechselwirkung, die durch die Coulombkraft vermittelt wird.

$$\dot{v} = \dot{v}_{ep} + \dot{v}_{cb} . \quad (3.6)$$

Neben diesen kontinuierlichen Veränderungen, die auf die Wechselwirkung mit dem Gas zurückzuführen sind, gibt es auch Streuprozesse. Sie werden durch Zusammenstöße von Staubteilchen untereinander verursacht und führen zu einer plötzlichen Umordnung in der Staubverteilung. Diesen Prozessen wird durch die Stoßterme auf der rechten Seite von Gleichung (3.2) Rechnung getragen.

Durch die Kollision mit anderen Staubpartikeln kann es zur Abtragung von Staubmaterial kommen. Projektil m' und Target m'' führen dabei einen vollständig inelastischen Stoß aus, wobei die Materie des entstehenden Partikels teilweise verdampft oder in Form kleinerer Fragmente herausgeschleudert wird. Als Folge bildet sich auf der Oberfläche ein Krater. Bei höheren Kollisionsgeschwindigkeiten kann es zur

vollständigen Zerschmetterung oder sogar zur totalen Vaporisation des Produktteilchens kommen. Diese Möglichkeiten werden mit folgender Massenbilanzgleichung erfaßt:

$$m' + m'' = m + \Delta m = m + \Delta m_{sh} + \Delta m_{vap} . \quad (3.7)$$

Die insgesamt abgetragene Masse Δm setzt sich dabei aus der fragmentierten Masse Δm_{sh} und der vaporisierten Masse Δm_{vap} zusammen.

Um die Geschwindigkeit des Produktpartikels zu berechnen, wird die vereinfachende Annahme gemacht, daß alle Massen nach dem Stoß die gleiche Geschwindigkeit besitzen. Das bei der Reaktion entstandene Teilchen bewegt sich somit mit dem Massenschwerpunkt des Systems.

$$m'v' + m''v'' = (m' + m'') v , \quad (3.8)$$

wobei v die Geschwindigkeit des Schwerpunkts bezeichnet.

Durch die Kraterbildung entsteht bei der Kollision zweier Eduktpartikel mit den Massen m' und m'' und den Geschwindigkeiten v' und v'' ein neues Teilchen. Die dabei abgetragene Materialmenge $\Delta m(m', m'', |v' - v''|)$ hängt neben den Massen der beteiligten Teilchen auch von deren Relativgeschwindigkeit ab. Das Ganze führt zu einer Zunahme der Partikel mit der Masse $m' + m'' - \Delta m$ und der resultierenden Geschwindigkeit v . Der gesamte Gewinn an Teilchen in einem zweidimensionalen Intervall von $[m, m + dm]$ und $[v, v + dv]$ errechnet sich durch die Integration über alle Partikelmassen und -geschwindigkeiten. Daraus ergibt sich für den dazugehörigen Stoßterm⁶

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} D(m, v) \right]_{cr+} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \alpha(m', m'', |v' - v''|) \\ &\times \delta(m + \Delta m(m', m'', |v' - v''|) - m' - m'') \delta\left(v - \frac{m'v' + m''v''}{m' + m''}\right) \\ &\times D(m', v') D(m'', v'') dm' dm'' dv' dv'' . \end{aligned} \quad (3.9)$$

Dabei sorgen die beiden δ -Funktionen dafür, daß die Integration genau dann einen Beitrag liefert, wenn Impuls- und Massenerhaltung erfüllt ist. α ist ein Maß für die Anzahl der Streuprozesse zweier Staubpartikel der Massen m' und m'' in einem gegebenen Zeitintervall.

$$\alpha(m', m'', |v' - v''|) = \sigma(m', m'', |v' - v''|) |v' - v''| , \quad (3.10)$$

mit dem Streuquerschnitt gemäß Gleichung (2.56).

$$\sigma(m', m'', |v' - v''|) = \pi (a' + a'')^2 \max\left(0, 1 - \left(\frac{v_k}{v' - v''}\right)^2\right) . \quad (3.11)$$

Während durch den Kraterbildungsprozeß Teilchen der Masse $m' + m'' - \Delta m$ gebildet werden, gehen Teilchen mit den Massen der Kollisionspartner verloren. Diese Abnahme wird durch den Stoßterm

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} D(m, v) \right]_{cr-} = -D(m, v) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \alpha(m, m', |v - v'|) D(m', v') dm' dv' \quad (3.12)$$

beschrieben.

⁶Die hier angegebenen Stoßterme, die die Umordnung der Staubverteilung durch Fragmentation und Vaporisation beschreiben, stellen eine Verallgemeinerung der von Wetherill (1990)^[54] aufgestellten Koagulationsgleichung dar. Suttner (1999)^[50] verwendete vergleichbare Stoßterme, um Koagulation und Shattering von Staubpartikeln in protostellaren Scheiben zu berechnen.

In den Partikelkollisionen werden durch Fragmentation neue Teilchen gebildet. Dieser Zunahme wird durch den Stoßterm

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial t} D(m, v) \right]_{sh+} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \alpha(m', m'', |v' - v''|) \\ &\times \beta(m, m', m'', |v' - v''|) \delta \left(v - \frac{m'v' + m''v''}{m' + m''} \right) \\ &\times D(m', v') D(m'', v'') dm' dm'' dv' dv'' \end{aligned} \quad (3.13)$$

Rechnung getragen. Die Größe der erzeugten Fragmente wird durch die Verteilungsfunktion

$$\beta(m, m', m'', |v' - v''|) = \frac{\Delta m_{sh}(m', m'', |v' - v''|)}{m} \phi(m', m'', m, |v' - v''|) \quad (3.14)$$

beschrieben. Die Anzahl der Partikel mit der Masse m , die maximal bei einem Zusammenstoß entstehen können, ist durch den Quotienten $\Delta m_{sh}/m$ gegeben. Der Anteil der Teilchen der insgesamt erzeugten Fragmente, die auf die Masse m entfallen, wird durch die Verteilung ϕ beschrieben. Dabei wird die Erhaltung der Masse durch die Normierung

$$\int_0^{\infty} \phi(m', m'', m, |v' - v''|) dm = 1 \quad (3.15)$$

gewährleistet.

3.2 Numerik

Im vorherigen Abschnitt wurde die Gleichung eingeführt, die die zeitliche Veränderung einer nicht orts aufgelösten Staubverteilung beschreibt. Im folgenden wird ein numerisches Modell entwickelt, in welchem die Gleichung (3.2) diskretisiert und gelöst wird.

3.2.1 Integrationsgitter

Die Rechnungen werden auf einem kartesischen Gitter ausgeführt, wie es in Abbildung 3.2 dargestellt ist. An den Rändern sind je zwei Zonen reserviert, um für die Rechnungen definierte Randbedingungen setzen zu können. Für die Simulationen werden Gitter mit den Abmessungen von 100×100 Zellen verwendet. Wie in Abbildung 3.1 angedeutet, sind die Variablen an unterschiedlichen Orten des Gitters lokalisiert. Die Teilchendichten $n_{i,j}$ und die damit verknüpften Werte der Dichtefunktion $D_{i,j}$ sind in den Zellenmittelpunkten definiert, die Geschwindigkeiten $\dot{m}_{i-1/2}$ und $\dot{v}_{j-1/2}$ an den Zellengrenzen.

In einer Zelle mit den Abmessungen Δm_i und Δv_j stehen die Teilchendichten mit der Verteilungsfunktion durch

$$D_{i,j} = \frac{n_{i,j}}{\Delta m_i \Delta v_j} \quad (3.16)$$

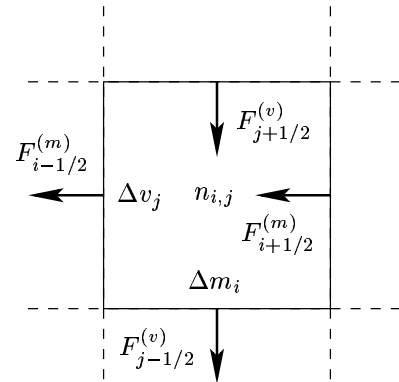


Abbildung 3.1: Die Änderung der Teilchendichte in einer Gitterzelle aufgrund der Teilchenflüsse durch deren Grenzen.

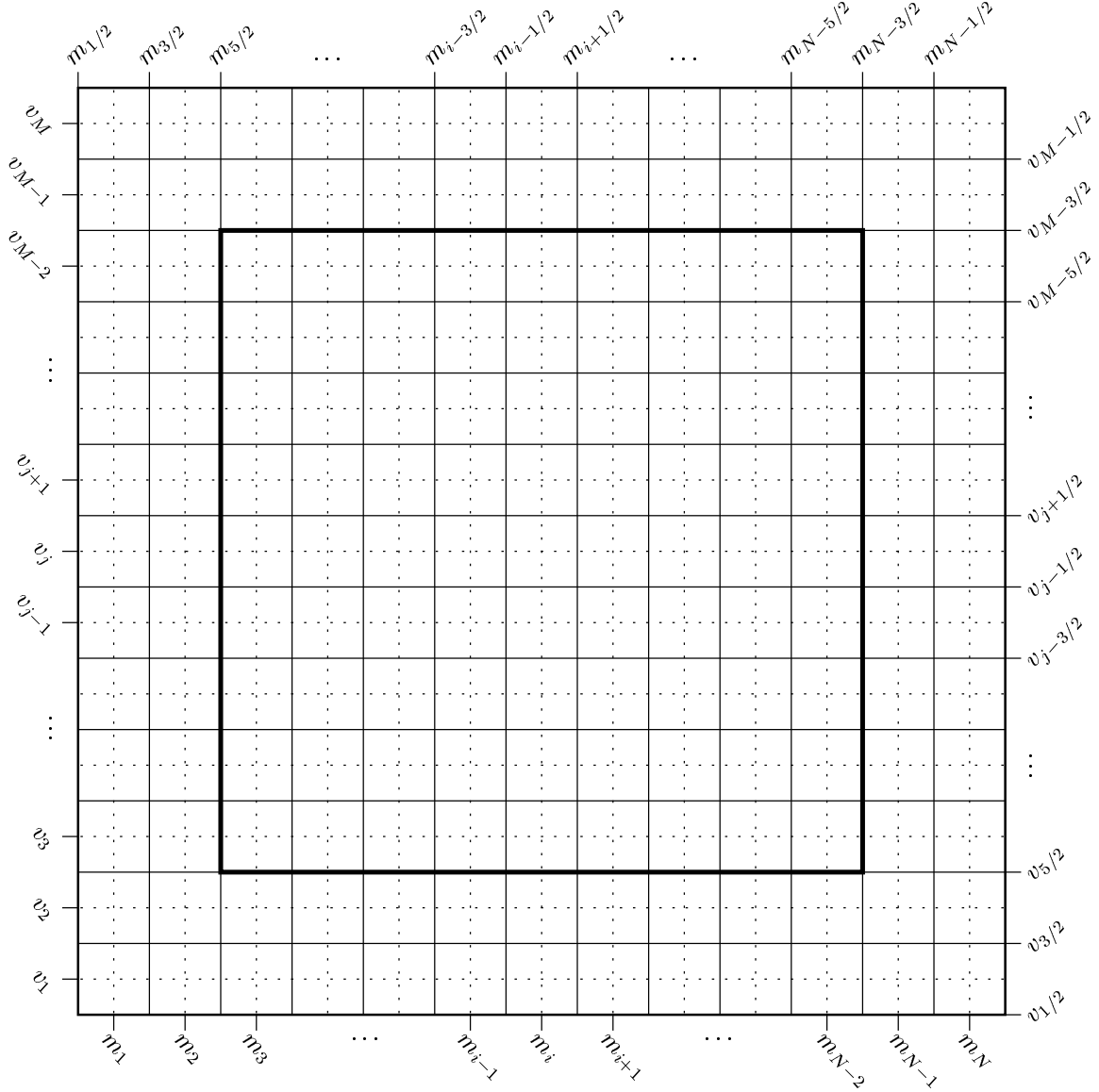


Abbildung 3.2: Der schematische Aufbau des Integrationsgitters.

in Beziehung. Die Teilchenflüsse durch die unteren Zellengrenzen sind durch die Gleichungen

$$F_{i-1/2,j}^{(m)} = D_{i,j} \dot{m}_{i-1/2,j} \Delta v_j = \frac{n_{i,j}}{\Delta m_i} \dot{m}_{i-1/2,j} , \quad (3.17)$$

$$F_{i,j-1/2}^{(v)} = D_{i,j} \dot{v}_{i,j-1/2} \Delta m_i = \frac{n_{i,j}}{\Delta v_j} \dot{v}_{i,j-1/2} \quad (3.18)$$

gegeben. Die Beschreibung der Flüsse an den Obergrenzen erfolgt analog.

Das Massenintervall $[m_{min}, m_{max}]$ der Staubpartikel erstreckt sich über mehrere Zehnerpotenzen. Daher werden für die Mittelpunkte und -grenzen der Massenbins logarithmische Abstände gewählt.

$$m_i = m_0 q^i , \quad (3.19)$$

$$m_{i-1/2} = m_0 q^{i-1/2} . \quad (3.20)$$

Die Konstanten m_0 und q werden so gewählt, daß für die Grenzen des Integrationsgebietes die Beziehungen $m_{5/2} = m_{min}$ und $m_{N-3/2} = m_{max}$ erfüllt sind. Für die Rechnungen wird angenommen, daß die

Staubpartikel Massen zwischen 6.5×10^{-21} g und 2.5×10^{-11} g besitzen. Die dazugehörigen Teilchenradien ergeben sich durch die Massendichte des Staubmaterials, das der jeweiligen Rechnung zugrunde gelegt wird.

Das zu berechnende Geschwindigkeitsintervall $[v_{min}, v_{max}]$ wird in gleich große Abschnitte unterteilt. Die Abstände der Mittelpunkte und -grenzen der Geschwindigkeitsbins sind konstant.

$$v_j = v_0 + j \Delta v , \quad (3.21)$$

$$v_{j-1/2} = v_0 + (j - 1/2) \Delta v . \quad (3.22)$$

Dabei werden v_0 und Δv so bestimmt, daß für die Ränder des Integrationsgitters $v_3 = v_{min}$ und $v_{M-2} = v_{max}$ gilt. In den Rechnungen werden Partikelgeschwindigkeiten zwischen 0 und bis zu 10^8 km s⁻¹ in Betracht gezogen.

Um im weiteren ein stabiles Verfahren zu etablieren, wird für alle Gitterzellen eine von null verschiedene Untergrenze der Teilchendichten eingeführt:

$$n_{i,j}^{(min)} = \frac{\rho_d^{(min)}}{m_i} . \quad (3.23)$$

Dabei wird für die minimale Massendichte des Staubes innerhalb einer Zelle $\rho_d^{(min)} = 10^{-49}$ g cm⁻³ angesetzt. Sollte bei einer Operation die Teilchendichte unter diese Grenze fallen, wird sie auf den Wert gesetzt, der von Gleichung (3.23) angegeben wird.

3.2.2 Transportterme

Bei Transportprozessen wechseln Staubpartikel von einer Gitterzelle in eine benachbarte. Die Gesamtzahl der Teilchen bleibt dabei erhalten. Daher gilt für diese Vorgänge eine Erhaltungsgleichung, die in integraler Form folgendermaßen dargestellt werden kann.

$$\frac{d}{dt} \iint_A D(m, v) dm dv = - \oint_S D(m, v) (\dot{v} dm + \dot{m} dv) . \quad (3.24)$$

Die Teilchendichte innerhalb eines geschlossenen Gebietes der m - v -Ebene ändert sich nur durch die Teilchenflüsse durch dessen Ränder. Die Wahl der Integralform als Grundlage für die Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung hat den Vorteil, daß das damit abgeleitete Berechnungsschema strikt die Teilchenhaltung garantiert.

In Abbildung 3.1 ist die Situation für ein rechteckiges Gebiet dargestellt. Die Änderung der Teilchendichte innerhalb der Zelle ergibt sich durch die Zu- und Abflüsse an den vier Zellengrenzen.

$$\frac{dD_{i,j}}{dt} \Delta A = -F . \quad (3.25)$$

Diese Gleichung kann wie folgt diskretisiert werden. Ist zum Zeitpunkt t_0 die Dichte innerhalb der Zelle $D_{i,j}^0$, kann ihr Wert zu einer späteren Zeit $t = t_0 + \Delta t$ durch das Differenzschema

$$(D_{i,j} - D_{i,j}^0) \frac{\Delta m_i \Delta v_j}{\Delta t} = F_{i-1/2,j}^{(m)} + F_{i,j-1/2}^{(v)} - F_{i+1/2,j}^{(m)} - F_{i,j+1/2}^{(v)} \quad (3.26)$$

bestimmt werden.

3.2.3 Stoßterme

Bei der Streuung von Staubpartikeln an anderen Staubteilchen reagieren diese miteinander und bilden neue Teilchen. Sind die Geschwindigkeiten unter denen diese Prozesse ablaufen hoch genug, kann es zur

Zerschmetterung der Produktteilchen kommen und es werden neue, kleinere Fragmente erzeugt. Alle diese Vorgänge haben zur Folge, daß an manchen Stellen der Staubverteilung Teilchen entfernt und an anderen Stellen Teilchen hinzugefügt werden. Diese Umverteilung wird durch die Ratengleichungen (3.13), (3.12) und (3.9) beschrieben. Um diese Veränderung auf dem numerischen Integrationsgitter berechnen zu können, müssen diese geeignet diskretisiert werden.

$$\begin{aligned} \dot{n}_{i,j} = & \frac{1}{2} \sum_{k,l} \sum_{m,n} \alpha_{k,l;m,n} \beta_{k,l;m,n;i} \delta_{k,l;m,n;j}^{(v)} n_{k,l} n_{m,n} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \sum_{m,n} \alpha_{k,l;m,n} \delta_{k,l;m,n;i}^{(m)} \delta_{k,l;m,n;j}^{(v)} n_{k,l} n_{m,n} \\ & - n_{i,j} \sum_{k,l} \alpha_{i,j;k,l} n_{k,l} . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Dabei liefert die Funktion $\delta_{k,l;m,n;i}^{(m)}$ genau dann einen Beitrag, falls das beim Cratering von Teilchen aus den Bins $n_{k,l}$ und $n_{m,n}$ entstehende Partikel in das Massenintervall i fällt. In allen anderen Fällen ist ihr Wert null. Analog dazu gilt $\delta_{k,l;m,n;j}^{(v)} = 1$, wenn das Produktteilchen aufgrund der Impulserhaltung in das Geschwindigkeitsintervall j fällt.

Die Funktion $\beta_{k,l;m,n;i}$ beschreibt die Verteilung der herausgeschlagenen Fragmente auf die Massenbins i , die bei der Kollision zweier Staubspezies aus den Bins $n_{k,l}$ und $n_{m,n}$ entstehen. Dabei hängt $\beta_{k,l;m,n;i}$ von den beteiligten Massen und der Relativgeschwindigkeit der kollidierenden Staubpartikel ab. In die Berechnung gehen außerdem Materialeigenschaften ein, die von dem zugrunde liegenden Staubpartikelmodell bestimmt werden. Die Verteilung hat die Form

$$\beta_{k,l;m,n;i} = \frac{\Delta m_{k,l;m,n}^{(sh)}}{m_i} \phi_{k,l;m,n;i} . \quad (3.28)$$

Die maximale Anzahl der Staubpartikel der Masse m_i , die durch die Kollision zweier Partikel aus den Gitterzellen $n_{k,l}$ und $n_{m,n}$ entstehen können, ist durch das Massenverhältnis $\Delta m_{k,l;m,n}^{(sh)}/m_i$ gegeben. $\Delta m_{k,l;m,n}^{(sh)}$ ist die bei der Kollision zerschmetterte Masse. Die Verteilungsfunktion $\phi_{k,l;m,n;i}$ bestimmt, welcher Anteil dabei auf die einzelnen Massenbins abfällt. Ihr genaues Aussehen wird durch die physikalischen Eigenschaften der Staubpartikel bestimmt. Durch die Normierung

$$\sum_i \phi_{k,l;m,n;i} = 1 \quad \text{mit} \quad \phi_{k,l;m,n;i} \in [0, 1] \quad (3.29)$$

wird die Massenerhaltung gewährleistet.

3.2.4 Berechnung des Zeitschritts

Mit Hilfe der Beziehung (3.16) kann man die Gleichung (3.26) in ein implizites Berechnungsschema für die Änderung der Partikeldichte innerhalb einer Gitterzelle umformen. Es ergibt sich

$$n_{i,j}^{\tau+1} = \frac{n_{i,j}^{\tau} - \Delta t \left(n_{i+1,j}^{\tau+1} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1}^{\tau+1} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2}}{\Delta v_{j+1}} \right)}{1 - \Delta t \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2}}{\Delta v_j} \right)} . \quad (3.30)$$

Die hochgestellten Indizes beziehen sich auf die Teilchendichten zu verschiedenen Zeitpunkten.

Mit dieser Beziehung ist es möglich die Werte von $n_{i,j}$ auf dem Integrationsgitter von den oberen Enden herab sukzessive zu berechnen. Da sowohl das Massen- als auch das Geschwindigkeitsintervall der Staubpartikel nach oben begrenzt sind, können an diesen Grenzen keine Teilchen in das Integrationsgebiet

einströmen. Die Teilchenflüsse an den Obergrenzen des Gitters sind somit bei jedem Zeitschritt gleich null. Unter dieser Annahme werden die Änderungen der Teilchendichten an den oberen Rändern durch

$$n_{N,j}^{\tau+1} = \frac{n_{N,j}^{\tau}}{1 - \Delta t \left(\frac{\dot{m}_{N-1/2,j}}{\Delta m_N} + \frac{\dot{v}_{N,j-1/2}}{\Delta v_j} \right)} \quad (3.31)$$

und

$$n_{i,M}^{\tau+1} = \frac{n_{i,M}^{\tau}}{1 - \Delta t \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,M}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,M-1/2}}{\Delta v_M} \right)} \quad (3.32)$$

beschrieben.

Für die Berechnung des Zeitschritts wird von dem Umstand Gebrauch gemacht, daß alle Geschwindigkeiten negativ sind. Durch die erosiven Prozesse verlieren die Staubteilchen permanent an Masse. Die Kopplung an das Gas sorgt dafür, daß sich die Geschwindigkeit des Staubes allmählich der Gasgeschwindigkeit annähert. Um das Integrationsgitter vollständig auszunutzen, wird als Untergrenze des Geschwindigkeitsintervalls die Geschwindigkeit des Gases gewählt, d. h.

$$v_3 = v_g . \quad (3.33)$$

Für die nicht orts aufgelösten Rechnungen wird v_g als konstant vorausgesetzt. Auf diese Weise wird gewährleistet, daß keine Staubteilchen das Integrationsgitter über die Untergrenze des Geschwindigkeitsintervalls verlassen können.

Weil das Verfahren implizit ist, ist es sehr stabil in Bezug auf die Wahl der Länge des Zeitschritts. Um für die Rechnungen zu den Transportprozessen brauchbare Werte dafür zu erhalten, werden mit Hilfe der Gleichung

$$\Delta t_{i,j}^{(tr)} = \min \left(\frac{\Delta m_i}{|\dot{m}_{i-1/2,j}|}, \frac{\Delta v_j}{|\dot{v}_{i,j-1/2}|} \right) \quad (3.34)$$

für jede einzelne Gitterzelle ein Zeitintervall bestimmt. Die Gesamtlänge des Transportzeitschritts wird durch das Minimum aller Zellen bestimmt.

$$\Delta t^{(tr)} = p \min \left(\Delta t_{i,j}^{(tr)} \right) . \quad (3.35)$$

Dabei ist p ein Parameter, mit dem der Zeitschritt während der Laufzeit einer Simulation variiert werden kann. Dies ist notwendig, da sich die Geschwindigkeit der Transportvorgänge im Zuge einer Rechnung sehr stark ändert. Zu Beginn laufen die Prozesse schnell ab, verlangsamen sich jedoch mit zunehmender Dauer. In den Rechnungen werden für den Parameter p Werte zwischen 10^{-2} und 10^2 verwendet.

Um die Änderung der Staubverteilung durch Streuprozesse zu berechnen, muß ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen der Gestalt

$$\frac{dn_{i,j}}{dt} = \dot{n}_{i,j}(n_{k,l}) \quad (3.36)$$

gelöst werden. Dabei ist die rechte Seite durch die Gleichung (3.27) gegeben. Um den Transportschritt mit einem impliziten Verfahren zu berechnen, muß für das Gleichungssystem $0 = n_{i,j}^{\tau+1} - n_{i,j}^{\tau} - \Delta t^{(sc)} \dot{n}_{i,j}(n_{k,l}^{\tau+1})$ eine Nullstelle gefunden werden. Da das System analytisch nicht auflösbar ist, muß die Nullstelle iterativ bestimmt werden. Dies ist aufgrund der großen Zahl an Gleichungen nicht praktikabel. Daher wird für die Berechnung eine explizite Methode gewählt. Als geeignet erwies sich dabei ein Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung. Die Teilchendichten auf dem Gitter werden hierbei in zwei Stufen ermittelt.

$$n_{i,j}^{\tau+1/2} = n_{i,j}^{\tau} + \frac{1}{2} \Delta t^{(sc)} \dot{n}_{i,j} \left(n_{k,l}^{\tau} \right) , \quad (3.37)$$

$$n_{i,j}^{\tau+1} = n_{i,j}^{\tau} + \Delta t^{(sc)} \dot{n}_{i,j} \left(n_{k,l}^{\tau+1/2} \right) . \quad (3.38)$$

Dabei muß für jeden Zeitschritt die Matrix $\dot{n}_{i,j}(n_{k,l})$ nur zweimal berechnet werden.

Explizite Verfahren haben die Eigenschaft, daß sie instabil werden, wenn der Zeitschritt $\Delta t^{(sc)}$ zu groß gewählt wird. Diese Beschränkung ist problematisch, da sich das zugrunde liegende Gleichungssystem sehr steif verhält. Das bedeutet, daß der Zeitschritt von den Bins limitiert wird, deren Teilchendichten sich schnell verändern. Das sind Zellen, in denen $n_{i,j}/\dot{n}_{i,j}$ große Werte annimmt. In der Praxis zeigt sich jedoch, daß es sich hierbei häufig um Fälle handelt, in denen die Teilchendichte ohnehin verschwindend klein ist. Für die Rechnung sind hauptsächlich die Zellen interessant, in denen $n_{i,j}$ groß ist. Aus diesem Grund werden Bins, deren Teilchendichte unterhalb einer Grenzdichte liegt, für die Bestimmung der Länge des Zeitschritts nicht berücksichtigt. Für diese Untergrenze erwies sich ein Wert von $n_{i,j}^{(lim)} = 10^{10} n_{i,j}^{(min)}$ als brauchbar.

Die Zeitschrittlänge für die Streuprozesse ergibt sich aus dem Minimum der Intervalle $\Delta t_{i,j}^{(sc)}$ aller Gitterzellen.

$$\Delta t^{(sc)} = q \min \left(\Delta t_{i,j}^{(sc)} \right). \quad (3.39)$$

Dabei werden die einzelnen Zeitintervalle durch die Beziehung

$$\Delta t_{i,j}^{(sc)} = \begin{cases} \left| \frac{n_{i,j}}{\dot{n}_{i,j}} \right| & \text{falls } \dot{n}_{i,j} < 0 \\ \infty & \text{falls } \dot{n}_{i,j} = 0 \\ 10^3 \left| \frac{n_{i,j}}{\dot{n}_{i,j}} \right| & \text{falls } \dot{n}_{i,j} > 0 \end{cases} \quad (3.40)$$

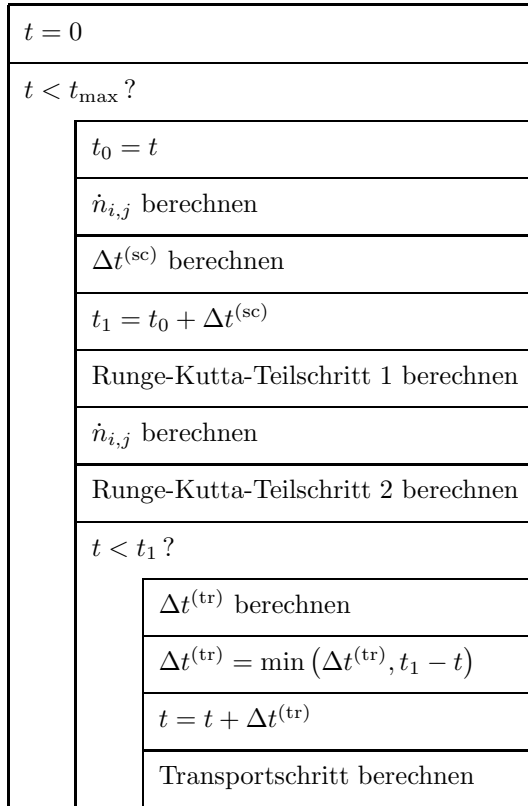


Abbildung 3.3: Das Struktogramm veranschaulicht die Berechnung eines Zeitschritts in dem sowohl Transportals auch Streuprozesse berechnet werden.

bestimmt. Die unterschiedliche Behandlung von positiven und negativen Änderungen von $n_{i,j}$ sorgt dafür, daß die Dichte einer Zelle innerhalb eines Schritts nicht unter Null fallen kann. Auf der anderen Seite wird dadurch erreicht, daß die Teilchendichte auch bei kleinen Ausgangswerten hinreichend schnell anwachsen kann. Das führt dazu, daß die Größe des Schritts nicht zu klein wird und das Verfahren dabei gleichzeitig stabil bleibt. Für den Parameter q werden Werte zwischen 1 und 10^{-5} verwendet.

Bei der Anwendung des Runge-Kutta-Verfahrens wie oben beschrieben, muß die Änderungsmatrix $\dot{n}_{i,j}(n_{k,l})$ bei einem Zeitschritt zweimal berechnet werden. Dazu müssen für ein Gitter der Größe $M \times N$ jeweils $N^2 M^2$ Operationen durchgeführt werden, was bei den verwendeten Gitterabmessungen mit einem erheblichen Zeitaufwand verbunden ist. Um die Rechendauer trotzdem in vertretbaren Grenzen zu halten, werden für die Bestimmung von $\dot{n}_{i,j}(n_{k,l})$ nur Zellen berücksichtigt, deren Teilchendichten oberhalb eines bestimmten Limits liegen. Die schwach besetzten Bins tragen nur geringfügig zur Veränderung der Staubverteilung bei, verzögern aber durch ihre große Anzahl den Fortgang der Kalkulation erheblich. Als sinnvoller Wert für die Grenze erwies sich dabei $n_{i,j}^{(lim)} = 10^{13} n_{i,j}^{(min)}$.

Bei der gleichzeitigen Berechnung von Transport- und Stoßprozessen wird ein gesplittetes Verfahren angewendet, d. h. beide Vorgänge werden innerhalb eines Zeitschrittes getrennt voneinander behandelt. Die Schrittlängen, die sich aus beiden Prozessen ergeben, unterscheiden sich. In der Regel gilt $\Delta t^{(\text{tr})} \ll \Delta t^{(\text{sc})}$. Dies führt bei der gleichzeitigen Behandlung dieser Reaktionen zu Problemen, da die Berechnung von Streuung erheblich aufwendiger ist. Daher ist es nicht möglich, daß bei jedem Transportschritt auch ein Runge-Kutta-Schritt berechnet wird. Durch das folgende Vorgehen wird Abhilfe geschaffen: Bei jedem Zeitschritt werden zunächst, wie oben beschrieben, mit dem Runge-Kutta-Verfahren die Streuprozesse berechnet. Anschließend werden die Transportvorgänge durch mehrmaliges Ausführen des Transportschrittes berechnet. In Abbildung 3.3 wird diese Vorgehensweise verdeutlicht.

4 Ergebnisse der Rechnungen ohne Ortsauflösung

In dieser Arbeit wird das einfachste Staubmodell verwendet. Die Staubpartikel werden darin als kompakte, sphärische Körper betrachtet. Daher gilt für den Zusammenhang zwischen Teilchenmasse und -radius

$$m = \frac{4\pi}{3} \varrho_m a^3 . \quad (4.1)$$

Dabei ist ϱ_m die Massendichte des Staubmaterials.

Für die Rechnungen wurde ein Gasgemisch aus atomarem Wasserstoff und Helium zugrunde gelegt. Dabei wurde ein festes Verhältnis beider Komponenten angenommen. Für Teilchendichten der Gasbestandteile gilt

$$n(\text{He}) = 0.1 n(\text{H}) . \quad (4.2)$$

Der Ionisationszustand des Gases ist wichtig für die Ankopplung des Staubes und die Abtragung von Staubmaterial durch Sputtering. Das Medium wird als vollständig ionisiert betrachtet. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Rechnungen für verschiedene Gasdichten und -temperaturen durchgeführt. Eine zeitliche Veränderung dieser Parameter wurde dabei nicht berücksichtigt.

Um die Entwicklung eines Ensembles von Staubpartikeln in einem solchen Medium zu veranschaulichen, ist in Abbildung 4.2 die Staubverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten der Rechnung dargestellt. Die Plots zeigen jeweils die Dichtefunktion $D(m, v)$ in Abhängigkeit von der Teilchenmasse und der relativen Geschwindigkeit zum umgebenden Medium. Um die Darstellungen besser vergleichen zu können, wurden die Abschnitte der z -Achsen identisch gewählt. Die absoluten Werte von $D(m, v)$ hängen darstellungsbedingt von den jeweiligen Abmessungen der Bins ab. Sie werden daher nicht angegeben.

Den Ausgangspunkt der Rechnung bildet ein Ensemble von Silikatpartikeln, das gleichmäßig auf alle Massenbins verteilt ist. Abbildung 4.2 (a) zeigt den Anfangszustand. Die Partikel bewegen sich mit einer Geschwindigkeit von 200 km s^{-1} relativ zum Gas, an das sie durch Coulombreibung und gemäß dem Epsteingesetz angekoppelt sind. Das Gas besitzt eine Dichte von $9.2 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ und ist $2.1 \times 10^6 \text{ K}$ heiß. Durch thermisches Sputtering verlieren die Staubteilchen kontinuierlich Oberflächenmaterial.

Durch die Reibung mit dem Gas werden die Staubteilchen abgebremst. Diese Beschleunigung ist von der Partikelmasse abhängig. Abbildung 4.2 (b) zeigt, daß zunächst die leichten Staubkörner davon betroffen sind. Die schwereren Teilchen werden nur allmählich beschleunigt, wie in den Abbildungen 4.2 (b) bis 4.2 (d) zu sehen ist.

Im Vergleich zur Beschleunigung spielt sich das Sputtering auf einer größeren Zeitskala ab. Dieses wird in Abbildung 4.2 (d) deutlich. Sie zeigt eine Momentaufnahme zum Zeitpunkt $t = 1.8 \times 10^8 \text{ s}$.

Die Beschleunigungsphase ist nun fast abgeschlossen. Bis auf die schwersten Staubteilchen haben alle die Gasgeschwindigkeit angenommen. Am unteren Ende der Massenskala ist eine leichte Abnahme der Teilchendichte erkennbar. Dies ist das erste Anzeichen dafür, daß ein Teil der kleinen Partikel als Folge des durch Sputtering verursachten Materialschwunds das untere Ende des Integrationsgebietes verlassen. Diesen Sachverhalt kann man in Abbildung 4.2 (e) noch genauer sehen. Alle Staubpartikel treiben nun

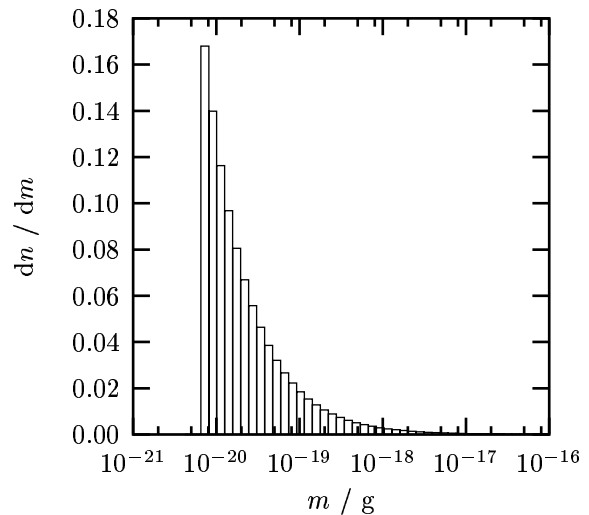


Abbildung 4.1: Die anfängliche Größenverteilung der Staubpartikel.

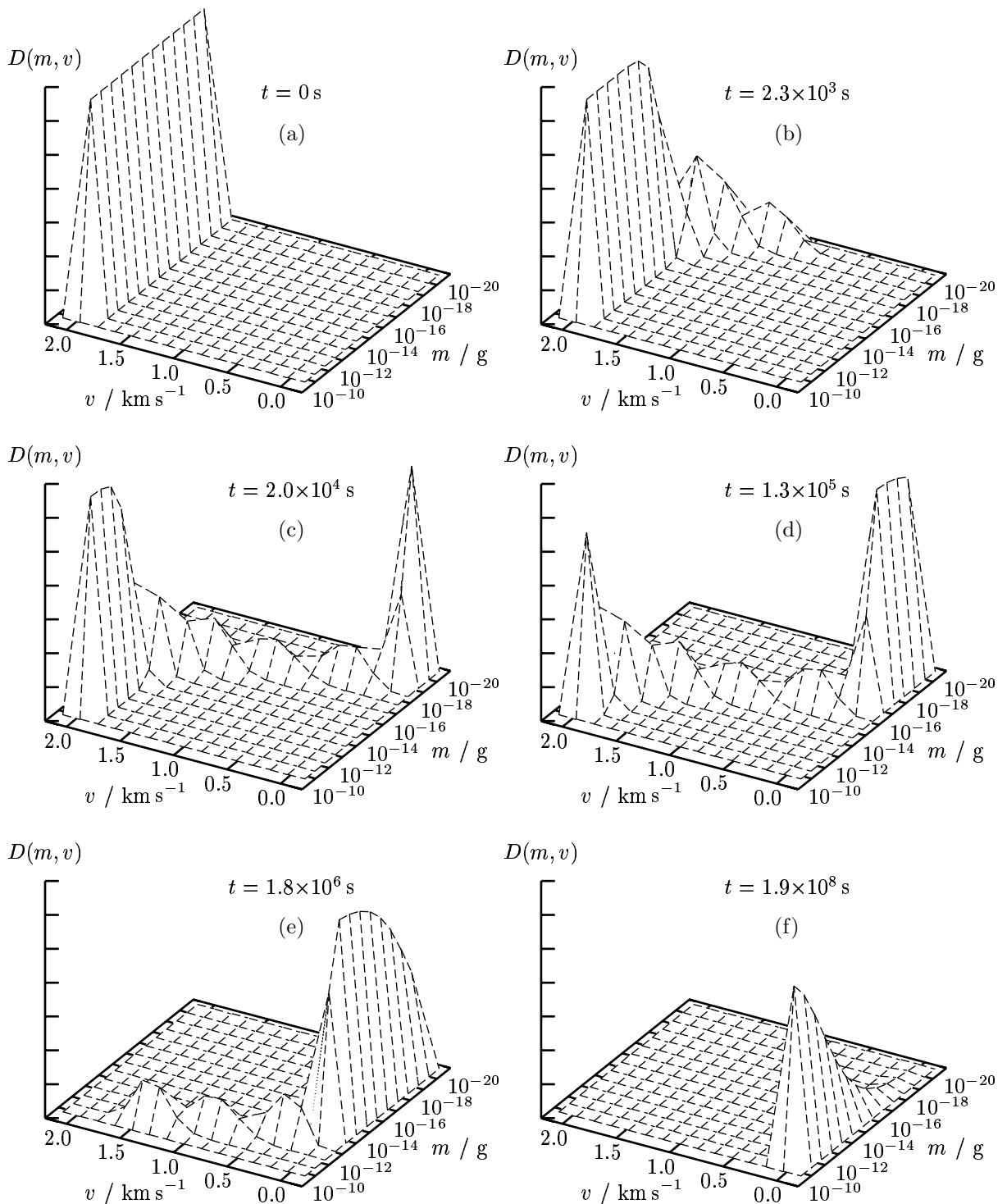


Abbildung 4.2: (a)–(f) Die zeitliche Entwicklung einer Verteilung von Silikateilchen, die sich relativ zum umgebenden Gas bewegen. Die Partikel sind durch Coulombreibung mit dem Gas gekoppelt und werden dadurch kontinuierlich abgebremst. Sie sind thermischem Sputtering unterworfen und verringern daher stetig ihre Größe. Die Kurven geben die Verteilung der Teilchen als Funktion der Masse und der Relativgeschwindigkeit zum umgebenden Medium zu verschiedenen Zeitpunkten wieder.

zusammen mit dem Gas. Der Verlust an Teilchen, von dem nun auch zunehmend schwerere Partikel betroffen sind, ist nun gut erkennbar. Dies wird vor allem durch den Vergleich mit der Ausgangssituation bei $t = 0$ deutlich.

Die unterschiedlichen Zeitskalen für Beschleunigung und Sputtering legen den Schluß nahe, daß das nicht-thermische Sputtering nur eine untergeordnete Rolle spielt. Im Gegensatz zum thermischen Sputtering müssen sich die Staubpartikel relativ zum Gas bewegen. Dies ist aber nur innerhalb der relativ kurzen Beschleunigungsphase möglich.

Die Annahme einer Gleichverteilung der Staubpartikel über die Massenbins, die in der Beispielrechnung als Anfangsbedingung zugrunde gelegt wurde, entspricht keinem realistischen Staubmodell. Sie wurde gewählt, um die zeitliche Entwicklung der Staubverteilung anschaulich darstellen zu können. In den übrigen Rechnungen wurde stattdessen eine Anfangsverteilung gewählt, die an die Ergebnisse von Mathis, Rumpl und Nordsieck (1977)^[30] angepaßt ist. Durch die Analyse von Absorptionsdaten ermittelten sie, daß die Teilchendichte innerhalb eines Radiusintervalls da im diffusen interstellaren Medium einem Potenzgesetz genügt.

$$\frac{dn}{da} \propto a^{-3.5} . \quad (4.3)$$

Diese Beziehung wird als MRN-Verteilung bezeichnet. Mit ihr ergibt sich für die Teilchendichte in einer Gitterzelle

$$n_{i,j} \propto \int_{a_{i-1/2,j}}^{a_{i+1/2,j}} a^{-3.5} da \propto \left(a_{i+1/2,j}^{-2.5} - a_{i-1/2,j}^{-2.5} \right) . \quad (4.4)$$

Dabei sind $a_{i\pm 1/2,j}$ die Radien der Staubteilchen an den Grenzen der Massenbins. Sie sind mit den dazugehörigen Massen $m_{i\pm 1/2,j}$ durch die Beziehung (4.1) verknüpft. Die Proportionalitätskonstante hängt von der Gesamtmasse des Staubes und dessen Materialdichte und dem Massenintervall ab. In Abbildung 4.1 ist das untere Ende der Anfangsverteilung dargestellt. Die gesammte Verteilung erstreckt sich bis 10^{-11} g.

4.1 Kopplung

In Abbildung 4.3 (a) ist die Beschleunigung eines Ensembles aus Silikatteilchen dargestellt, das sich zunächst mit einer Geschwindigkeit von 200 km s^{-1} relativ zu dem es umgebenden Gas bewegt und dann kontinuierlich durch die Reibung mit ihm abgebremst wird. Das Medium besitzt eine Temperatur von 10^5 K bei einer Dichte von $9 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$. Die Graphen zeigen die mittlere Geschwindigkeit des Ensembles in Abhängigkeit von der Zeit. Sie stellen die Ergebnisse der verschiedenen Kopplungsmechanismen dar. Dabei wurde die Geschwindigkeit über die Staubdichten der einzelnen Bins gemittelt.

$$\bar{v} = \frac{\sum_{i,j} n_{i,j} m_{i,j} v_{i,j}}{\sum_{i,j} n_{i,j} m_{i,j}} . \quad (4.5)$$

Die Kurven zeigen, daß die Kopplung, die durch das Epsteingesetz beschrieben wird, effektiver ist, als die indirekte Kopplung durch die Coulombwechselwirkung mit den Gasionen. Erst bei niedrigeren Geschwindigkeiten wird die Coulombkopplung wichtiger. Die dritte Kurve in Abbildung 4.3 (a) zeigt das Ergebnis, wenn beide Kopplungsmechanismen berücksichtigt werden. Bei hohen Geschwindigkeiten, d. h. kleineren Zeiten, fällt diese mit der Kurve der Epsteinkopplung zusammen. Mit wachsender Zeit weicht sie davon aber immer mehr ab, was auf den zusätzlichen Beitrag der Coulombreibung zurückzuführen ist.

Abbildung 4.3 (b) stellt das Ergebnis für ein heißeres Gas mit gleicher Dichte dar. Die Temperatur beträgt hier 2×10^5 K. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie oben, mit dem Unterschied, daß der Einfluß

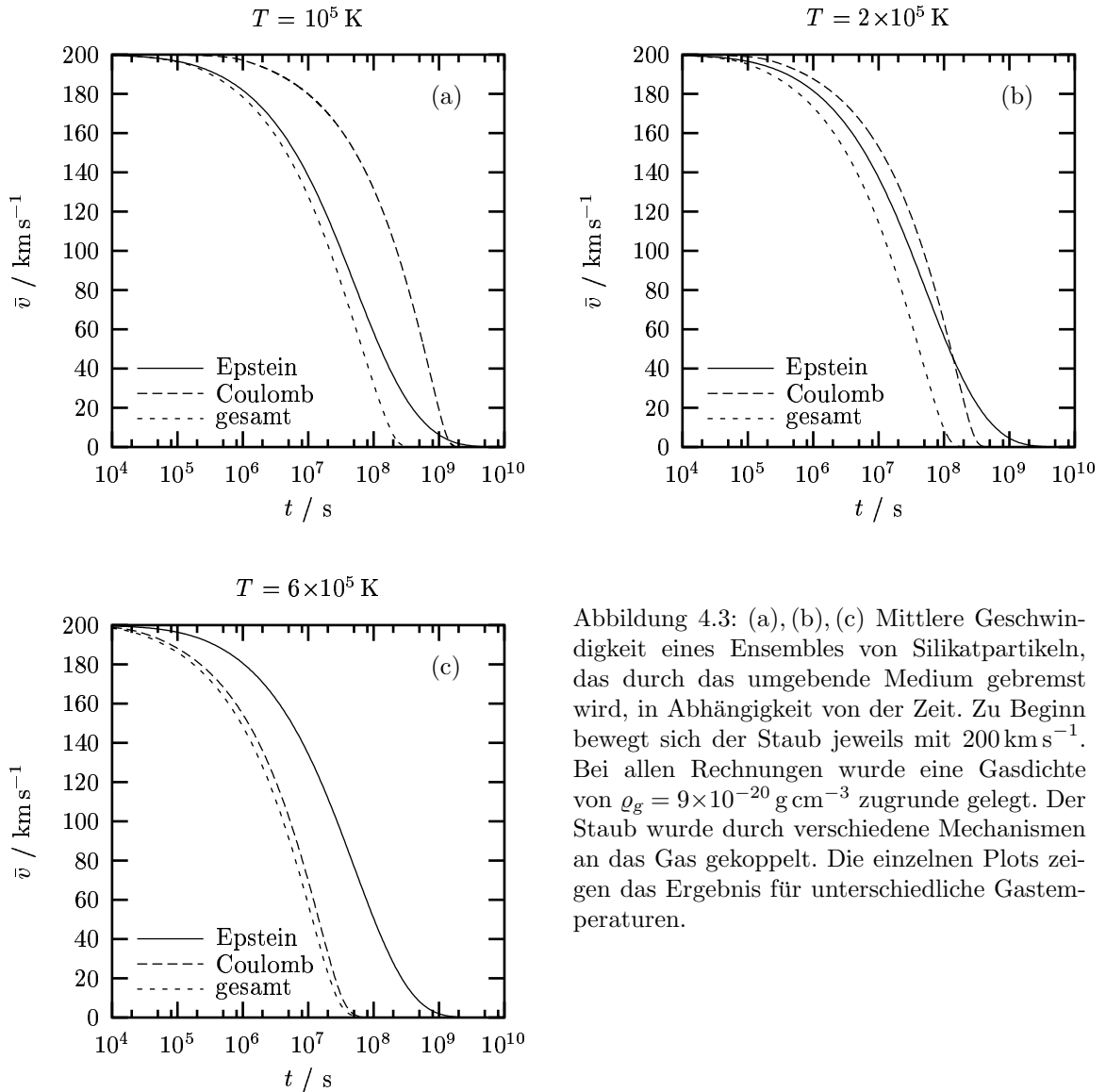


Abbildung 4.3: (a), (b), (c) Mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von Silikatpartikeln, das durch das umgebende Medium gebremst wird, in Abhängigkeit von der Zeit. Zu Beginn bewegt sich der Staub jeweils mit 200 km s^{-1} . Bei allen Rechnungen wurde eine Gasdichte von $\rho_g = 9 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ zugrunde gelegt. Der Staub wurde durch verschiedene Mechanismen an das Gas gekoppelt. Die einzelnen Plots zeigen das Ergebnis für unterschiedliche Gastemperaturen.

der Coulombreibung zunimmt. Schon bei etwa 40 km s^{-1} liegt die dazugehörige Kurve unter der Epsteinreibung. Dieses Ereignis tritt in der vorhergehenden Abbildung erst bei sehr niedrigen Geschwindigkeiten ein. Mit steigender Gastemperatur setzt sich dieser Trend fort. Abbildung 4.3 (c) zeigt die Situation für ein Gas mit der Temperatur $6 \times 10^5 \text{ K}$. Die Beschleunigung wird nun gänzlich von der Coulombreibung bestimmt. Direkte Stöße mit den Ionen spielen nur noch eine untergeordnete Rolle.

Um die Zeitskalen, auf denen sich diese Vorgänge abspielen, abzuschätzen, wurde die zeitliche Entwicklung der mittleren Ensemblesgeschwindigkeit für verschiedene Gastemperaturen berechnet. Anschließend wurde die Zeit ermittelt, die benötigt wird um den Staub auf eine Geschwindigkeit $\bar{v} < 1 \text{ km s}^{-1}$ abzubremesen. Die Rechnung wurde für verschiedene Staubmaterialien durchgeführt. Abbildung 4.4 (a) zeigt die Beschleunigungszeit in Abhängigkeit von der Temperatur, die sich für die Epsteinreibung ergibt. Die bessere Kopplung bei höheren Temperaturen ist auf die Temperaturabhängigkeit der adiabatischen Schallgeschwindigkeit zurückzuführen. Aufgrund ihrer größeren Querschnittsfläche bei gleicher Masse sind die Staubpartikel, die aus Materialien mit niedrigerer Dichte bestehen, besser an das Gas angekoppelt.

In Abbildung 4.4 (b) ist das Ergebnis für Staubverteilungen, die durch Coulombreibung an das Gas

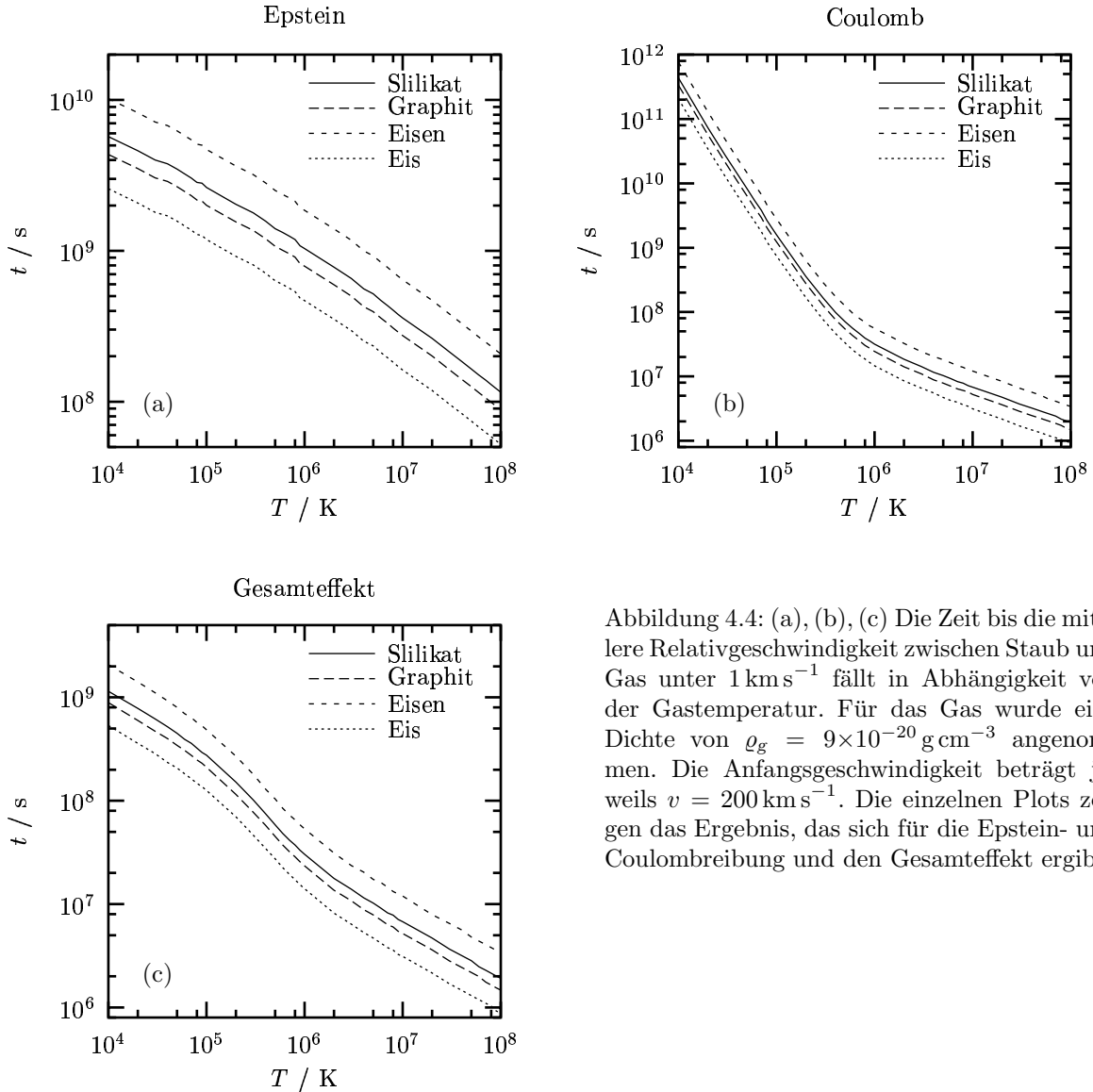


Abbildung 4.4: (a), (b), (c) Die Zeit bis die mittlere Relativgeschwindigkeit zwischen Staub und Gas unter 1 km s^{-1} fällt in Abhängigkeit von der Gastemperatur. Für das Gas wurde eine Dichte von $\rho_g = 9 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ angenommen. Die Anfangsgeschwindigkeit beträgt jeweils $v = 200 \text{ km s}^{-1}$. Die einzelnen Plots zeigen das Ergebnis, das sich für die Epstein- und Coulombreibung und den Gesamteffekt ergibt.

gekoppelt sind, dargestellt. Es zeigt sich, daß bei niedrigeren Temperaturen im Vergleich zur Kopplung durch das Epsteingesetz die Zeitspannen größer sind. Abbildung 4.4 (c) zeigt das Ergebnis der Rechnung, wenn beide Kopplungsmechanismen berücksichtigt werden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Staubprozesse im Zusammenhang mit Stoßwellen untersucht. Daher muß der Parameterbereich von heißem, geschocktem Gas⁷ genauer betrachtet werden. Abbildung 4.5 (a) zeigt die zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit eines Ensembles aus Silikatteilchen relativ zum umgebenden Medium. Dabei wurde folgendes Szenario angenommen: Der Staub ruht zunächst in einem Gas mit der Dichte $2.3 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ und der Temperatur 20 K. Das Medium wird nun von einer Stoßwelle mit der Schockgeschwindigkeit $v_s = 200 \text{ km s}^{-1}$ überholt, wodurch das Gas komprimiert und beschleunigt wird. Dabei heizt es sich stark auf. Es besitzt nun eine Temperatur von $2 \times 10^6 \text{ K}$ bei einer Dichte von $9.2 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$. Die Staubpartikel reagieren auf diese Veränderung nur sehr träge. Zunächst bewegen sie sich mit der Stoßgeschwindigkeit relativ zum Gas und werden dann langsam von ihm

⁷Der Zustand von geschocktem Gas wird durch die Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen beschrieben. Auf diese wird in Abschnitt 5.3.2 näher eingegangen.

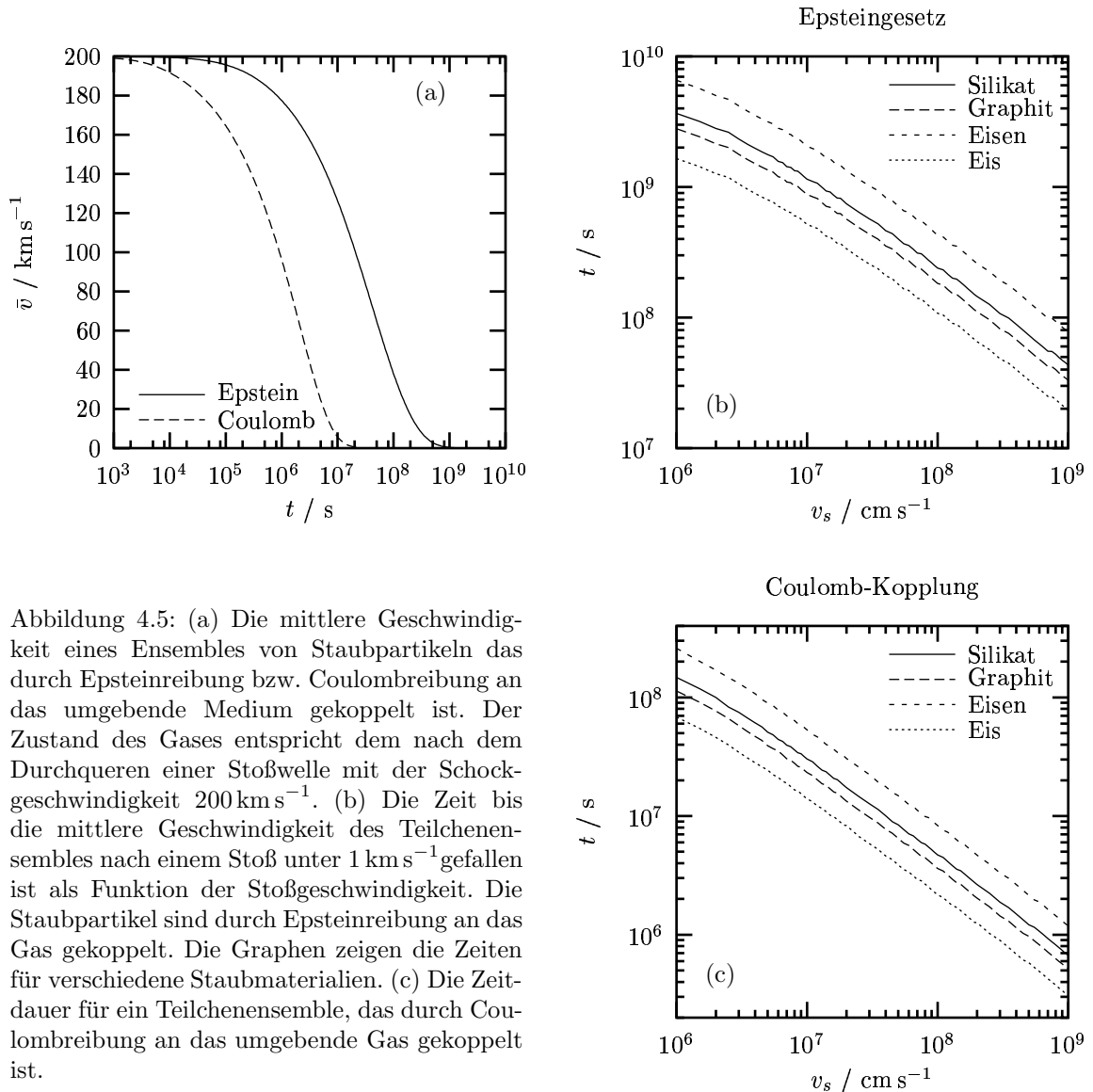


Abbildung 4.5: (a) Die mittlere Geschwindigkeit eines Ensembles von Staubpartikeln das durch Epsteinreibung bzw. Coulombreibung an das umgebende Medium gekoppelt ist. Der Zustand des Gases entspricht dem nach dem Durchqueren einer Stoßwelle mit der Schockgeschwindigkeit 200 km s^{-1} . (b) Die Zeit bis die mittlere Geschwindigkeit des Teilchenensembles nach einem Stoß unter 1 km s^{-1} gefallen ist als Funktion der Stoßgeschwindigkeit. Die Staubpartikel sind durch Epsteinreibung an das Gas gekoppelt. Die Graphen zeigen die Zeiten für verschiedene Staubmaterialien. (c) Die Zeitdauer für ein Teilchenensemble, das durch Coulombreibung an das umgebende Gas gekoppelt ist.

abgebremst. Die beiden Kurven geben den Verlauf der mittleren Partikelgeschwindigkeit für die beiden Fälle wieder, in denen die Kopplung entweder durch Epsteinreibung oder durch Coulombwechselwirkung erfolgt. Sie verdeutlichen, daß unter den zugrunde gelegten Bedingungen die indirekte Kopplung über die Coulombkraft wesentlich effektiver ist, als der Einfluß durch direkte Kollisionen mit den Gasionen.

Die Abbildungen 4.5 (b) und 4.5 (c) veranschaulichen die Zeitskalen, auf denen sich die Beschleunigung durch die beiden Kopplungsmechanismen abspielen. Um die Plots zu erzeugen, wurden für verschiedene Stoßgeschwindigkeiten die Zeiten ermittelt, die nötig sind, bis die mittlere Relativgeschwindigkeit unter 1 km s^{-1} fällt. Dabei wurden verschiedene Staubmaterialien berücksichtigt. Es zeigt sich, daß die Beschleunigung aufgrund der Coulombkopplung stets höher ist als bei der Epsteinkopplung.

Es erweist sich, daß Coulombreibung vor allem in heißen Medien mit hoher Ionisation wichtig ist. Die Kopplung nimmt allerdings bei großen Relativgeschwindigkeiten ab. Dieses Verhalten läßt sich mit der Abschätzung 2.26 verstehen, die bei hohen Geschwindigkeiten eine gute Näherung darstellt. Für die Beschleunigung gilt demnach $\dot{v} \propto v^{-2}$. Umgekehrt ist die Kopplung durch direkte Stöße mit den Gasteilchen, wie sie durch das Epsteingesetz beschrieben wird, vor allem bei niedrigen Temperaturen und

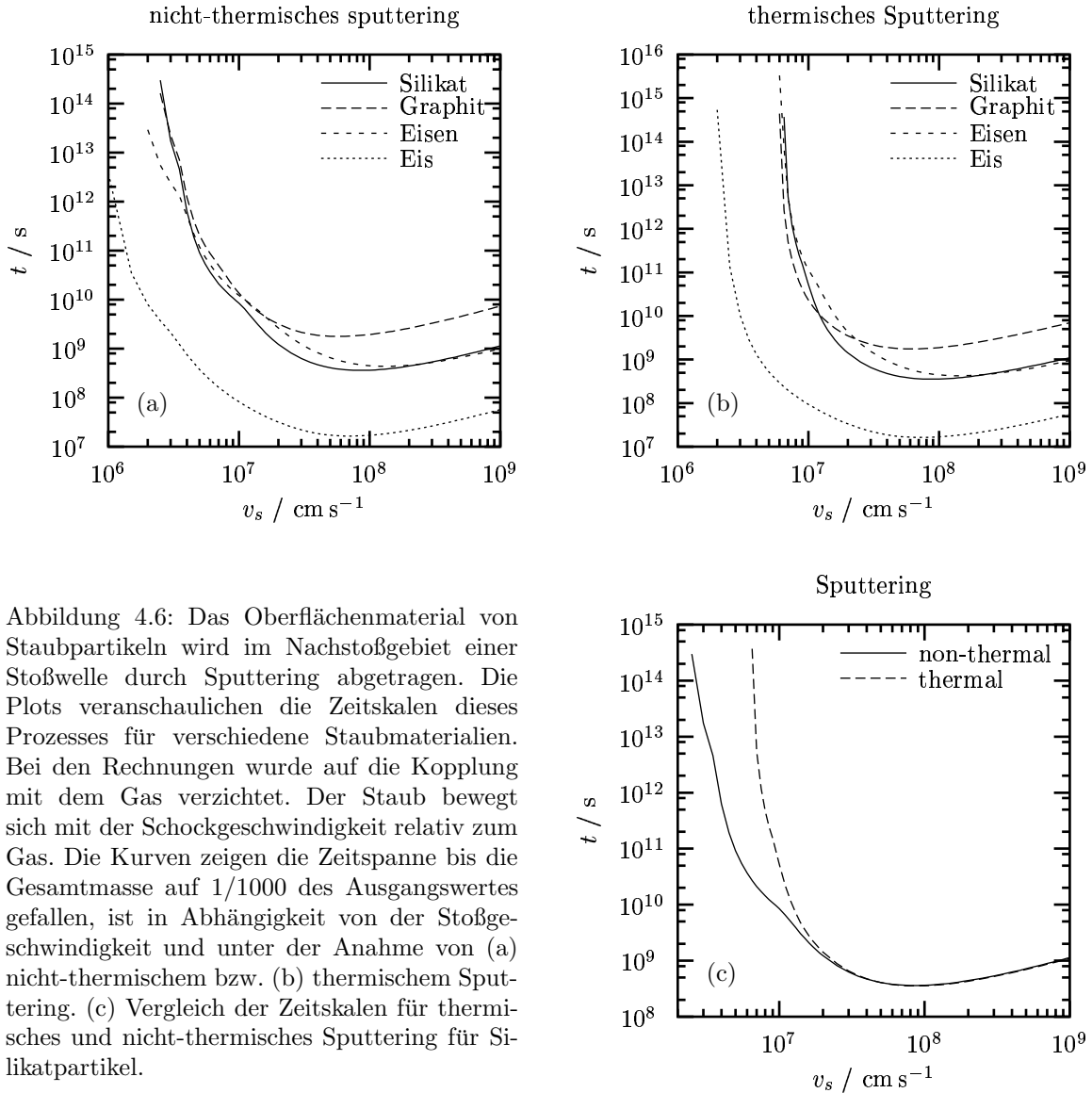


Abbildung 4.6: Das Oberflächenmaterial von Staubpartikeln wird im Nachstoßgebiet einer Stoßwelle durch Sputtering abgetragen. Die Plots veranschaulichen die Zeitskalen dieses Prozesses für verschiedene Staubmaterialien. Bei den Rechnungen wurde auf die Kopplung mit dem Gas verzichtet. Der Staub bewegt sich mit der Schockgeschwindigkeit relativ zum Gas. Die Kurven zeigen die Zeitspanne bis die Gesamtmasse auf $1/1000$ des Ausgangswertes gefallen, ist in Abhängigkeit von der Stoßgeschwindigkeit und unter der Annahme von (a) nicht-thermischem bzw. (b) thermischem Sputtering. (c) Vergleich der Zeitskalen für thermisches und nicht-thermisches Sputtering für Silikatpartikel.

hohen Geschwindigkeiten wichtig. In einem neutralen Medium ist sie der einzige Kopplungsmechanismus. Unmittelbar nach einer Stoßwelle ist das Gas heiß und vollständig ionisiert. In dieser Umgebung ist die Coulombreibung dominant. Epsteinreibung wird erst wieder wichtig, wenn das Gas abgekühlt und die Ionisation durch Rekombination abgeklungen ist.

4.2 Sputtering

Für die Modellierung von Sputtering wurde die Wirkung von H^+ - und He^+ -Ionen und von Ionen aus der CNO-Gruppe einbezogen. Dabei wurden die einzelnen Elemente gemäß ihrer kosmischen Häufigkeit berücksichtigt.

Weil nicht-thermisches Sputtering eine Relativgeschwindigkeit zwischen dem Staub und dem umgebenden Medium voraussetzt, kann es nur während der Beschleunigungsphase der Staubpartikel auftreten. Da diese sehr kurz ist, ist nur ein kleiner Effekt zu erwarten. Um diesen genauer zu untersuchen, wird zunächst auf die Kopplung mit dem Gas verzichtet. Es wurde der Masseverlust durch nicht-thermisches

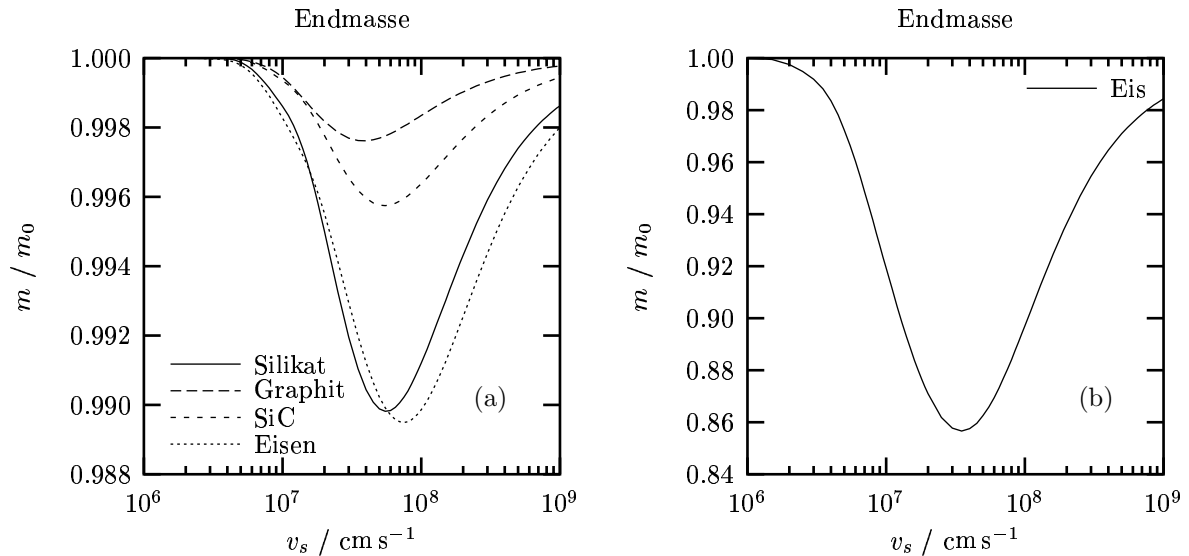


Abbildung 4.7: (a), (b) Die Endmasse des Staubes, die sich in einer Schockwelle unter dem Einfluß von nicht-thermischem Sputtering bei verschiedenen Stoßgeschwindigkeiten v_s einstellt. Die Staubpartikel sind durch Epstein- und Coulombreibung an das Gas gekoppelt. Die Graphen zeigen die Masse der Staubpartikel, die nach dem Abklingen des Zerstörungsprozesses noch vorhanden ist, bezogen auf die Anfangsmasse.

Sputtering für eine Staubverteilung, die von einer Stoßwelle überholt wird, berechnet. Die Werte für die Gasdichte und Temperatur vor dem Stoß sind $2.3 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ und 20 K. Abbildung 4.6 (a) zeigt die Zeit, in der die gesamte Massendichte des Staubes unter $1/1000$ des Ausgangswertes gefallen ist, in Abhängigkeit von der Schockgeschwindigkeit. Die einzelnen Kurven geben die Ergebnisse für Staubteilchen aus verschiedenen Materialien wieder. Man beobachtet bei Geschwindigkeiten $v_s < 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ zunächst eine starke Abnahme der Zeitdauer, die sich dann zunehmend abschwächt. Bei $v_s \approx 10^8 \text{ cm s}^{-1}$ weisen alle Kurven ein Minimum auf. Dies ist auf die geringere Effektivität des Sputterings bei hohen Geschwindigkeiten zurückzuführen. Der Masseverlust des leichtflüchtigen Eises erfolgt besonders schnell. Die Zeitskala liegt etwa zwei Größenordnungen unter der anderer Materialien.

Abbildung 4.6 (b) zeigt das Ergebnis für eine Staubverteilung, die thermischem Sputtering ausgesetzt ist. Ansonsten ist die Situation die gleiche wie vorher. Das Verhalten entspricht dem des nicht-thermischen Sputterings, mit der Ausnahme, daß unterhalb von $v_s \lesssim 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ thermisches Sputtering weniger effektiv ist. Zum Vergleich sind in Abbildung 4.6 (c) die beiden Kurven für Silikatpartikel in einem Plot aufgetragen.

Bleibt die Kopplung an das Gas unberücksichtigt, sind die Effekte der beiden Sputteringmechanismen vergleichbar. Um den Einfluß der Reibung des umgebenden Mediums auf das nicht-thermische Sputtering zu untersuchen, wurde die der Abbildung 4.6 (b) zugrunde liegende Rechnung unter der Berücksichtigung von Coulomb- und Epstein-Kopplung wiederholt. Abbildung 4.7 zeigt die Endmasse des Staubensembles, die sich nach dem Ende der Beschleunigungsphase einstellt, als Funktion der Schockgeschwindigkeit. Die einzelnen Kurven geben die Ergebnisse für die einzelnen Staubmaterialien wieder. Wie im vorhergehenden Beispiel zeigt sich ein maximaler Effekt, der hier bei allen untersuchten Materialien zwischen $4 \times 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ und $8 \times 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ auftritt. Der Masseverlust ist insgesamt gering. Er liegt bei allen Materialien im Bereich unterhalb von 1%. Lediglich bei Eispartikeln beobachtet man im Maximum einen Verlust von etwa 14%. Dies legt den Schluß nahe, daß nicht-thermisches Sputtering im Vergleich zum thermischen Sputtering vernachlässigbar ist.

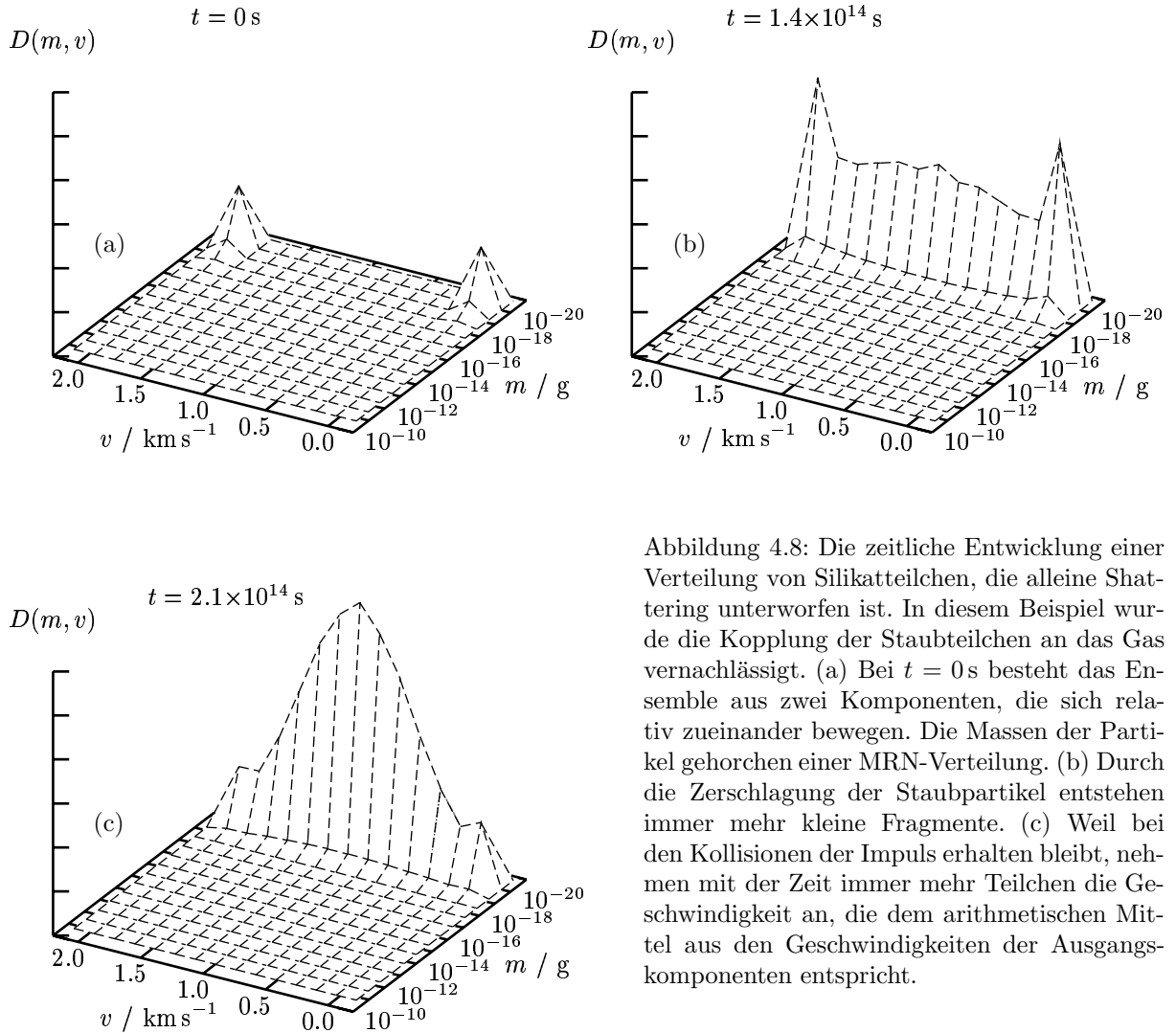


Abbildung 4.8: Die zeitliche Entwicklung einer Verteilung von Silikateilchen, die alleine Shattering unterworfen ist. In diesem Beispiel wurde die Kopplung der Staubteilchen an das Gas vernachlässigt. (a) Bei $t = 0$ s besteht das Ensemble aus zwei Komponenten, die sich relativ zueinander bewegen. Die Massen der Partikel gehorchen einer MRN-Verteilung. (b) Durch die Zerschlagung der Staubpartikel entstehen immer mehr kleine Fragmente. (c) Weil bei den Kollisionen der Impuls erhalten bleibt, nehmen mit der Zeit immer mehr Teilchen die Geschwindigkeit an, die dem arithmetischen Mittel aus den Geschwindigkeiten der Ausgangskomponenten entspricht.

4.3 Streuprozesse

Bevor die Streuprozesse genauer untersucht werden, soll zunächst die Zeitskala, auf denen sich diese abspielen, abgeschätzt werden. In einem Medium aus Gas und gleichartigen, sphärischen Staubpartikeln beträgt die mittlere freie Weglänge

$$l = \frac{1}{\pi 4a^2 n_d} . \quad (4.6)$$

Dabei sind n_d die Teilchendichte des Staubes und a ist der Radius der Staubpartikel. Für die Größe und die Masse der Staubteilchen wird $a = 10^{-5}$ cm und $m = 10^{-14}$ g angesetzt. Unter der Annahme eines Massenanteils von $\varrho_d = 0.01 \varrho_g$ des Staubes ergibt sich für ein Gas der Dichte 10^{-19} g cm $^{-3}$ eine Weglänge von der Größenordnung $l = 10^{14}$ cm. Für ein Staubteilchen, das sich mit der Relativgeschwindigkeit 10^7 cm s $^{-1}$ in diesem Medium bewegt, erhält man eine Zeit von 10^7 s für die mittlere Dauer zwischen zwei Kollisionen. Diese ist vergleichbar mit der Beschleunigungszeitskala. Um einen großen Einfluß der Streuung zu erreichen, sollte sie aber wesentlich kleiner sein. Aus diesem Grund kann man bei der Berücksichtigung der Kopplung von Staub an das Gas nur wenig Streuung erwarten. Für die Untersuchung der Streuprozesse wird auf Kopplung verzichtet.

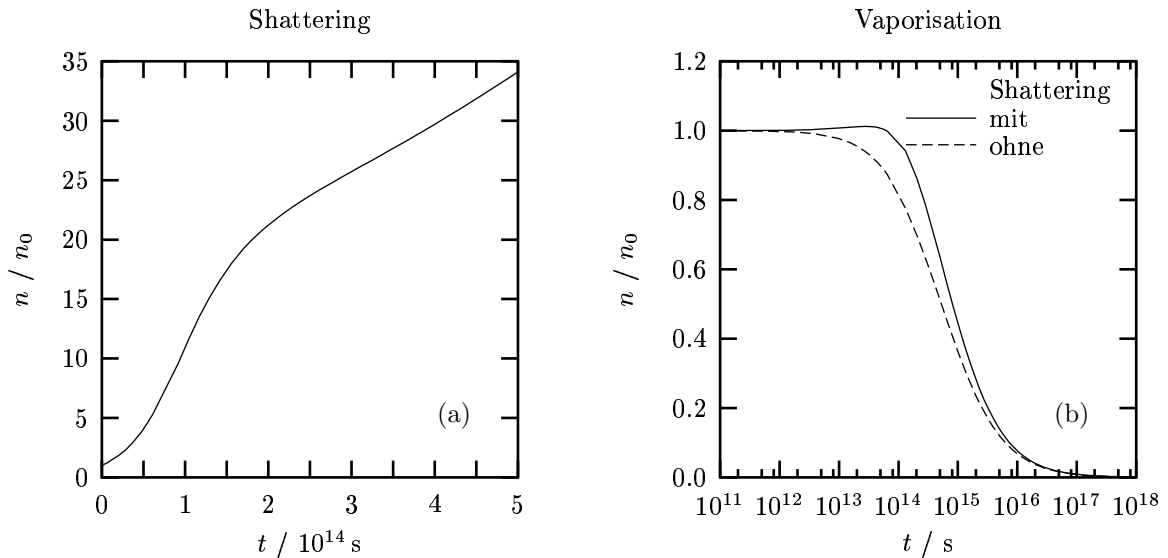


Abbildung 4.9: Die zeitliche Entwicklung der Partikeldichten einer Verteilung von Silikatteilchen durch Streuprozesse. (a) Die Teilchen werden durch Zusammenstöße untereinander fragmentiert. (b) Die Partikel werden durch die Kollisionen vaporisiert. Die beiden Kurven zeigen das Ergebnis wenn die Teilchen zusätzlich Shattering unterworfen sind und nicht.

Abbildung 4.8 zeigt die zeitliche Entwicklung zweier Staubkomponenten aus Silikat, die sich mit einer Geschwindigkeit von 200 km s^{-1} relativ zueinander bewegen. Die Plots zeigen die Dichtefunktion $D(m, v)$ zu verschiedenen Zeiten, wobei die Abschnitte auf den z -Achsen zur besseren Vergleichbarkeit identisch gewählt wurden. Die Komponenten sind entsprechend Gleichung (4.3) verteilt. In Partikelkollisionen werden die Staubteilchen teilweise oder ganz in kleinere Teile zerschlagen. Die Größen der so entstehenden Fragmente werden in dem Modell durch die MRN-Verteilung beschrieben. Dabei nehmen die Produktteilchen die Geschwindigkeit an, die durch die Impulserhaltung vorgegeben ist. Dies führt dazu, daß immer mehr kleine Teilchen mit mittleren Geschwindigkeiten produziert werden, die zwischen den der Ausgangskomponenten liegt. Dies kann in Abbildung 4.8 (b) abgelesen werden. Abbildung 4.8 (c) zeigt, daß mit zunehmender Dauer der Rechnung sich die gesamte Staubmasse in den Bins mit der geringsten Masse und der Geschwindigkeit 100 km s^{-1} sammeln. Die Geschwindigkeit entspricht dem arithmetischen Mittel aus den Ausgangsgeschwindigkeiten. Abbildung 4.9 (a) stellt die Entwicklung der Staubteilchendichte dar. Die Dichte steigt monoton. Zu Beginn zeigt sich eine Zunahme des Wachstums, die bei 1.75×10^{14} s in einen linearen Anstieg übergeht.

Durch den Shatteringprozeß vergrößert sich die Staubteilchendichte, während die Gesamtmasse konstant bleibt. Bei der Berücksichtigung von Vaporisation verringert sich die Massendichte des Staubes. Abbildung 4.9 (b) veranschaulicht die Ergebnisse zweier Rechnungen. Die beiden Graphen zeigen die zeitabhängigen Gesamtteilchendichten zweier Staubkomponenten, die sich relativ zueinander bewegen. Dabei wurden die gleichen Anfangsbedingungen wie im vorherigen Beispiel gewählt. Im Gegensatz dazu wurde dabei allerdings die Vaporisation von Staubmaterial im Zuge von Partikelkollisionen berücksichtigt. Die beiden Kurven zeigen das Ergebnis ohne und mit Berücksichtigung von Shattering. Ein merklicher Verlust von Teilchen tritt nach etwa 10^{13} s auf. Nach 10^{17} s ist der größte Teil der Partikel zerstört. Im Vergleich zur Zeitskala der Beschleunigung ist diese Zeitspanne zu lang, um bei der Berücksichtigung einer Kopplung zwischen Gas und Staub einen nennenswerten Effekt zu erreichen.

Damit zeigt sich, daß es nicht möglich ist im Rahmen eines nicht-ortsaufgelösten Modells die Streuprozesse adäquat nachzubilden. Räumliche Effekte spielen dabei eine wichtige Rolle. Durchdringen Staub-

teilchen eine Stoßfront, werden zunächst die leichten Staubpartikel abgebremst. Dadurch bildet sich kurz hinter der Front ein Gebiet mit einer hohen Dichte von kleinen Staubpartikeln aus. Größere Partikel, die in dieses Gebiet vorstoßen, können an diesen gestreut werden. Aufgrund der hohen Konzentration der kleinen Staubteilchen kann es zu einem merklichen Effekt kommen.

5 Stationäres 1D-Staubmodell

Mit Hilfe des im vorherigen Abschnitt vorgestellten Modells, können dynamische und erosive Staubprozesse nachgebildet werden. Es ist damit allerdings nur sehr unzureichend möglich, räumliche Phänomene zu untersuchen. Das Modell für diesen Zweck einfach um eine Ortskoordinate zu erweitern, ist sehr aufwendig und für zeitabhängige Rechnungen nicht praktikabel. Es ist aber geeignet um stationäre Lösungen zu finden. Daher wird in den folgenden Abschnitten das Modell um eine räumliche Dimension ergänzt. Um die Staubprozesse, die nach dem Durchgang durch eine Stoßfront ablaufen, zu untersuchen, werden die hydrodynamischen Gleichungen für einen stationären Schock gelöst. Die Veränderung, die eine Staubverteilung bei der Durchquerung des so berechneten Profils erfährt, wird bestimmt. Dabei wird die Rückwirkung auf das Gas berücksichtigt.

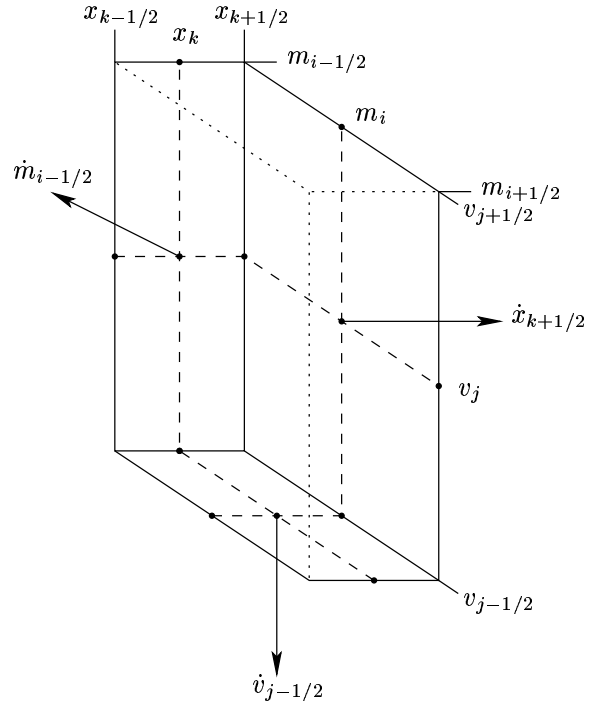


Abbildung 5.1: Eine Gitterzelle des dreidimensionalen Integrationsgitters.

5.1 Gleichungen

Die Staubverteilung wird durch eine Verteilungsfunktion $D(m, v, x)$ beschrieben, die durch eine zusätzliche Ortsvariable x erweitert ist. Die Anzahl der Teilchen in einem Volumen $V = A(x_2 - x_1)$, die sich innerhalb des Massenintervalls $[m_1, m_2]$ und des Geschwindigkeitsintervalls $[v_1, v_2]$ befinden, ist durch

$$N = A \int_{x_1}^{x_2} \int_{v_1}^{v_2} \int_{m_1}^{m_2} D(m, v, x) dm dv dx \quad (5.1)$$

gegeben. Die Teilchenzahl ist mit der Teilchendichte durch die Beziehung

$$n = \frac{N}{A \Delta x} \quad (5.2)$$

verknüpft, dabei gilt $\Delta x = x_2 - x_1$.

Durch die Bewegung der Staubpartikel im Raum wird die Verteilungsfunktion verändert. Um dem Rechnung zu tragen, wird die Kontinuitätsgleichung (3.2) um einen zusätzlichen Term ergänzt, der die Drift der Staubpartikel entlang der x -Koordinate beschreibt.

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial(D \dot{m})}{\partial m} + \frac{\partial(D \dot{v})}{\partial v} + \frac{\partial(D \dot{x})}{\partial x} = \sum_i \left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_i \quad (5.3)$$

Dabei gelten die Nebenbedingungen

$$\dot{m} = \dot{m}(m, v, x), \quad (5.4)$$

$$\dot{v} = \dot{v}(m, v, x), \quad (5.5)$$

$$\dot{x} = v. \quad (5.6)$$

Die Massenverlustrate und die Beschleunigung hängen von der Masse, der Partikelgeschwindigkeit und dem Ort ab. Die Driftgeschwindigkeit der Staubpartikel entspricht der Zeitableitung der Ortskoordinate.

Die Kontinuitätsgleichung (5.3) wird in integraler Form gelöst. Die Änderung der Teilchenzahl in einem geschlossenen Gebiet ist durch die Flüsse durch dessen Oberfläche gegeben.

$$\begin{aligned}\dot{N} &= A \frac{d}{dt} \iiint_V D(m, v, x) dm dv dx \\ &= -A \oint_O D(m, v, x) (\dot{m} dv dx + \dot{v} dm dx + \dot{x} dm dv) + \dot{N}_{sc}.\end{aligned}\quad (5.7)$$

Dabei ist \dot{N}_{sc} der zusätzliche Beitrag, der aus den Streuprozessen resultiert. Er entspricht der rechten Seite von Gleichung (5.3).

5.2 Diskretisierung der Staubgleichungen

Die Gleichungen werden auf einem Integrationsgitter ausgeführt, wie es in Abschnitt 3.2.1 beschrieben wurde. Es wird lediglich um eine räumliche Koordinate erweitert. In Abbildung 5.1 ist eine Zelle dieses Gitters dargestellt. Die Variablen $n_{i,j,k}$ bzw. $D_{i,j,k}$ sind in den Zellmittelpunkten definiert, die Geschwindigkeiten $\dot{m}_{i\pm 1/2,j,k}$, $\dot{v}_{i,j\pm 1/2}$ und $\dot{x}_{i,j,k\pm 1/2}$ auf den Grenzen. Die Breiten Δx_k der Gitterzellen sind variabel und werden an die jeweilige Situation angepaßt.

Ist die Dichtefunktion wie in Gleichung (5.1) angegeben definiert, ergibt sich für den Zusammenhang mit der Teilchendichte die Beziehung

$$D_{i,j,k} = \frac{n_{i,j,k}}{\Delta m_i \Delta v_j}.\quad (5.8)$$

Bei den ortsaufgelösten Rechnungen ist die Gasgeschwindigkeit nicht länger eine Konstante. Sie wird vielmehr von der Hydrodynamik bestimmt, die simultan mit den Staubprozessen berechnet werden muß. Daher fällt sie mit unterschiedlichen Geschwindigkeitsbins zusammen. Diese Situation ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Weil die Beschleunigung der Staubteilchen immer in Richtung der Gasgeschwindigkeit zeigt, teilt sich das Integrationsgebiet in drei verschiedene Bereiche auf; in zwei Teilgebiete (I, III) in denen \dot{v} entweder negativ oder positiv ist und in das Teilgebiet (II), das aus den Zellen gebildet wird, die mit der Gasgeschwindigkeit zusammenfallen.

Die Zahl der Teilchen $N_{i,j,k}$ einer Zelle aus dem Teilgebiet I des Integrationsgitters hat die Abmessungen Δm_i , Δv_j und Δx_k . Die Änderung der Anzahl wird durch die Teilchenflüsse zwischen der Zelle und ihren Nachbarn bestimmt. Dazu kommt der Beitrag $\dot{N}_{i,j,k}$ aus den Streuprozessen. Daraus kann man ein

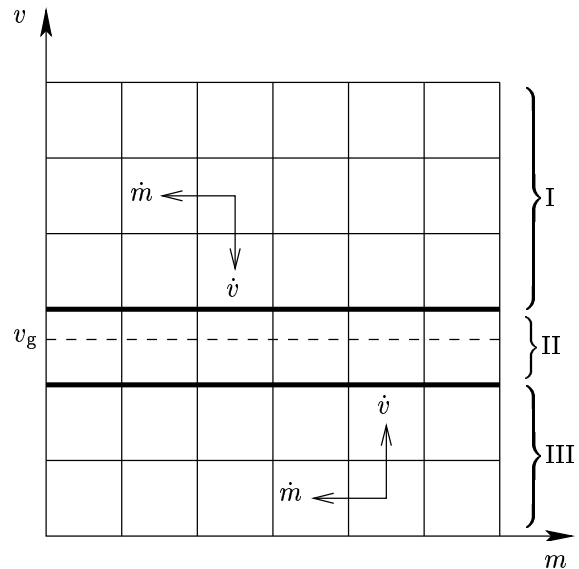


Abbildung 5.2: Aufteilung des Integrationsgebietes in Teilbereiche mit gleich gerichteten Staubbeschleunigungen.

implizites Differenzenschema bilden:

$$\begin{aligned} \frac{N_{i,j,k} - N_{i,j,k}^0}{\Delta t} &= N_{i,j,k} \frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + N_{i,j,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + N_{i,j,k} \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \\ &\quad - N_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - N_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} - N_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} \\ &\quad + \dot{N}_{i,j,k} . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Dabei ist $N_{i,j,k}^0$ die Teilchenzahl zum Zeitpunkt t_0 . Diese Beziehung für die Teilchenzahlen kann in eine für die Anzahldichten umgeformt werden.

$$\begin{aligned} (n_{i,j,k} - n_{i,j,k}^0) \frac{A \Delta x_k}{\Delta t} &= A \Delta x_k n_{i,j,k} \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \right) \\ &\quad - A \Delta x_k \left(n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} \right) \\ &\quad + A \Delta x_k \dot{n}_{i,j,k} . \end{aligned} \quad (5.10)$$

Der Beitrag der Streuung hat dabei die folgende Form:

$$\begin{aligned} \dot{n}_{i,j,k} &= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} \alpha_{p,q;r,s} \beta_{p,q;r,s;i} \delta_{p,q;r,s;j}^{(v)} n_{p,q,k} n_{r,s,k} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{p,q} \sum_{r,s} \alpha_{p,q;r,s} \delta_{p,q;r,s;i}^{(m)} \delta_{p,q;r,s;j}^{(v)} n_{p,q,k} n_{r,s,k} \\ &\quad - n_{i,j,k} \sum_{p,q} \alpha_{i,j;p,q} n_{p,q,k} . \end{aligned} \quad (5.11)$$

Da bei einem Streuvorgang der Ort der beteiligten Teilchen unverändert bleibt, ist diese mit Gleichung (3.27) identisch.

Damit kann die Teilchendichte der betrachteten Zelle durch die Beziehung

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i,j,k}^0 - \Delta t \left(n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} - \dot{n}_{i,j,k} \right)}{1 - \Delta t \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \right)} \quad (5.12)$$

berechnet werden. Durch den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow \infty$ ergibt sich daraus die stationäre Lösung für das Teilgebiet I.

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} . \quad (5.13)$$

Aufgrund der unterschiedlichen Strömungsverhältnisse ergeben sich für die übrigen Gebiete andere Lösungen. Die Rechnungen hierfür werden in Anhang C angegeben. Die Ergebnisse sind für Gebiet II

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} - n_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} \quad (5.14)$$

und für Gebiet III

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - n_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} - \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} . \quad (5.15)$$

5.3 Stationäre Lösung der hydrodynamischen Gleichungen

Die Entwicklung des Staubes innerhalb einer zeitlich konstanten Stoßwelle soll berechnet werden. Zu diesem Zweck wird für die hydrodynamischen Gleichungen eine stationäre Lösung berechnet. Als Grundlage hierfür dient ein physikalisches Modell von Suttner (1996),^[47] welches neben der Strömung auch chemische Prozesse innerhalb des Gases beschreibt. Das Gas wird darin als Gemisch aus Wasserstoff und Helium betrachtet. Der Wasserstoff tritt darin sowohl in atomarer als auch in molekularer Form auf, wobei die beiden Komponenten durch Dissoziation und Reassoziaton ineinander übergeführt werden können. Der Dissoziationsgrad des Gases wird durch die Variable f_{H_2} beschrieben.

In den folgenden Abschnitten wird das System der Gleichungen, die die hydrodynamischen und chemischen Vorgänge beschreiben, vorgestellt. Es wird auf das numerische Verfahren, das zur Lösung des Gleichungssystem verwendet wird, eingegangen. Anschließend werden die physikalischen Grundlagen des Modells besprochen.

5.3.1 Das Gleichungssystem

Die hydrodynamischen Gleichungen werden für den Spezialfall einer stationären Strömung gelöst. Das bedeutet, daß die Zeitableitungen $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ gesetzt werden. Das System aus partiellen Differentialgleichungen reduziert sich dabei auf eines, das aus gewöhnlichen Differentialgleichungen besteht.

Das System wird durch Gleichungen für die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie beschrieben.

$$\frac{d}{dx} (\varrho_g v_g) = 0, \quad (5.16)$$

$$\frac{d}{dx} (\varrho_g v_g^2 + p) = 0, \quad (5.17)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} \varrho_g v_g^3 + e v_g + p v_g \right) = -\Lambda(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T). \quad (5.18)$$

Das System kann Energie durch Strahlung abgeben. Diesem Umstand wird durch den Kühlungsterm Λ in Gleichung (5.18) Rechnung getragen. Die Kühlungsfunktion ist an die Verhältnisse in dichten Molekülwolken angepaßt. Für die Lösung des Systems werden die Zustandsgleichungen für die innere Energie und den Gasdruck

$$e = \varrho_g c_V T, \quad (5.19)$$

$$p = \frac{\varrho_g \mathcal{R} T}{\mu} \quad (5.20)$$

benötigt. Daneben existiert eine weitere Gleichung, welche die Umwandlung von molekularem zu atomarem Wasserstoff beschreibt und umgekehrt.

$$\frac{d}{dx} (\varrho_g f_{\text{H}_2} v_g) = 1.4 m_{\text{H}} (R(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T) - D(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T)). \quad (5.21)$$

Die Raten von Dissoziation und Reassoziaton von Wasserstoff werden durch die Koeffizienten D und R angegeben. Sie liegen, wie auch die Kühlungsterme, im Code in tabellierter Form vor. Auf die Reaktions- und Kühlungsmechanismen selbst und die Wechselwirkung des Staubes mit der Hydrodynamik, wird später näher eingegangen. Zunächst soll das Lösungsverfahren für das Gleichungssystem erläutert werden.

Sind die Variablen am Ort x_k bekannt, kann man mit Hilfe der Substitutionen

$$a_k = \varrho_{g,k} v_{g,k}, \quad (5.22)$$

$$b_k = \varrho_{g,k} v_{g,k}^2 + p_k, \quad (5.23)$$

$$c_k = \frac{1}{2} \varrho_{g,k} v_{g,k}^3 + (e_k + p_k) v_{g,k}, \quad (5.24)$$

$$d_k = \varrho_{g,k} f_{\text{H}_2,k} v_{g,k}. \quad (5.25)$$

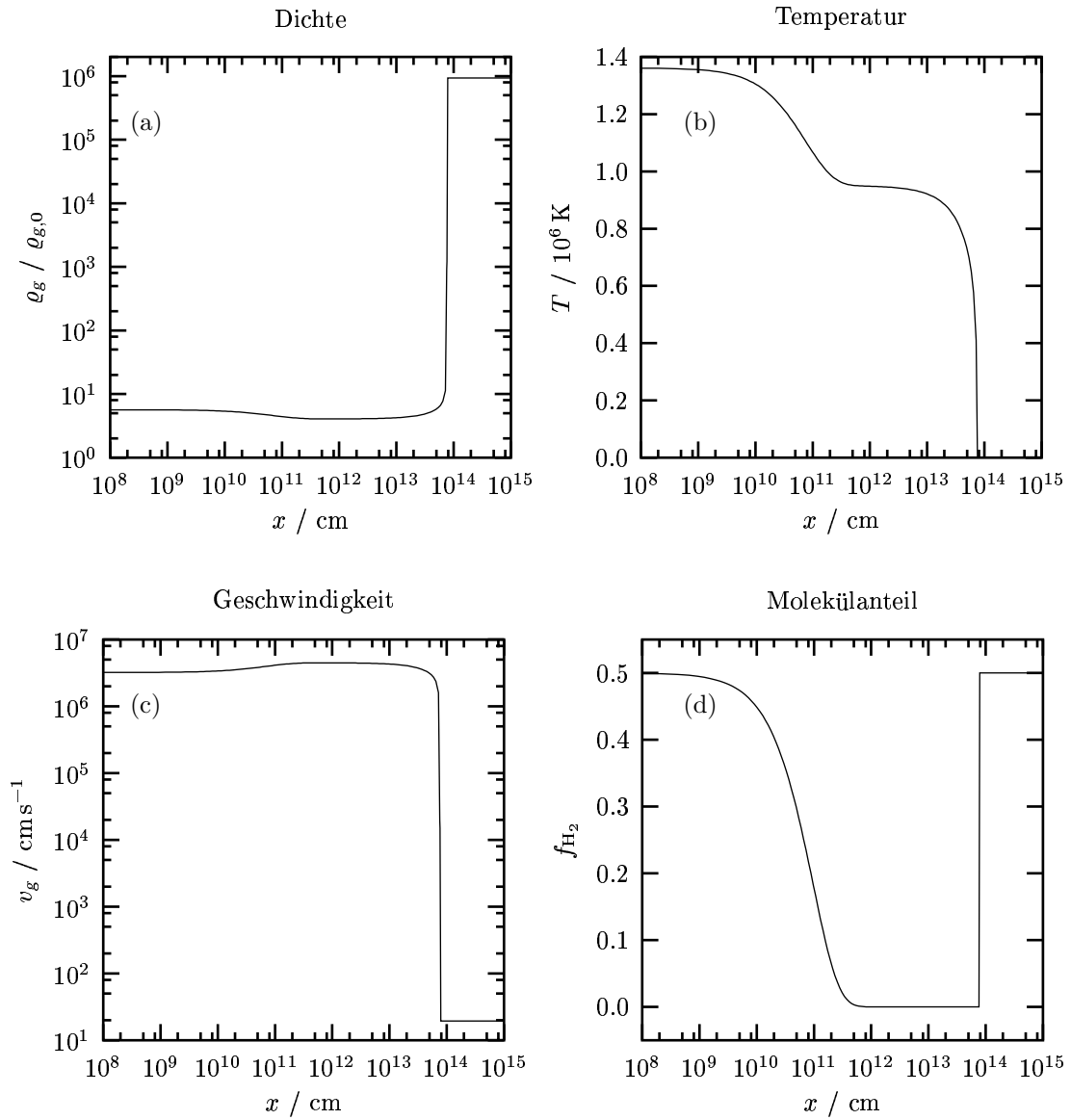


Abbildung 5.3: Die Kurven zeigen die hydrodynamischen Variablen in Abhängigkeit der Entfernung von der Stoßfront. Die Schockgeschwindigkeit beträgt $v_s = 150 \text{ km s}^{-1}$. Das Gas vor dem Stoß besitzt eine Dichte von $2.32 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$, eine Temperatur von 10 K und ist vollständig molekular ($f_{\text{H}_2} = 0.5$). Die Variablen sind (a) die Gasdichte, (b) die Gastemperatur, (c) die Geschwindigkeit, mit der sich das Gas von Stoßfront entfernt und (d) der Molekülanteil.

das System der hydrodynamischen Gleichungen in eine Form bringen, die auf einfache Weise numerisch integriert werden kann.

$$a_k = \text{const} , \quad (5.26)$$

$$b_k = \text{const} , \quad (5.27)$$

$$c'_k = -\Lambda(\varrho_{g,k}, f_{\text{H}_2,k}, T_k) , \quad (5.28)$$

$$d'_k = 1.4 m_{\text{H}} (R(\varrho_{g,k}, f_{\text{H}_2,k}, T_k) - D(\varrho_{g,k}, f_{\text{H}_2,k}, T_k)) . \quad (5.29)$$

Mit diesen Gleichungen kann man den Wert der Variablen bei x_{k+1} wie folgt näherungsweise berechnen.

$$a_{k+1} = a_k , \quad (5.30)$$

$$b_{k+1} = b_k , \quad (5.31)$$

$$c_{k+1} = c_k + (x_{k+1} - x_k) c'_k , \quad (5.32)$$

$$d_{k+1} = d_k + (x_{k+1} - x_k) d'_k . \quad (5.33)$$

Dabei werden die Gleichungen (5.32) und (5.33) mit Hilfe eines Runge-Kutta-Verfahrens gelöst. Sind nun a , b , c und d bekannt, kann man die hydrodynamischen Variablen am Ort x berechnen, indem man das System der Gleichungen (5.22), (5.23), (5.24) und (5.25) invertiert.

$$\begin{aligned} \delta_{k+1} = & 5280a_{k+1}^2 c_{k+1} d_{k+1} - 3872a_{k+1}^3 c_{k+1} - 3300a_{k+1} b_{k+1}^2 d_{k+1} \\ & - 1600a_{k+1} c_{k+1} d_{k+1}^2 + 3025a_{k+1}^2 b_{k+1}^2 + 900b_{k+1}^2 d_{k+1}^2 , \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$v_{g,k+1} = \frac{55a_{k+1} b_{k+1} - 30b_{k+1} d_{k+1} \mp \sqrt{\delta_{k+1}}}{88a_{k+1}^2 - 40a_{k+1} d_{k+1}} , \quad (5.35)$$

$$\varrho_{g,k+1} = -\frac{30a_{k+1} b_{k+1} d_{k+1} - 55a_{k+1}^2 b_{k+1} + 44a_{k+1}^3 v_{g,k+1} - 20a_{k+1}^2 d_{k+1} v_{g,k+1}}{22a_{k+1} c_{k+1} - 20c_{k+1} d_{k+1}} , \quad (5.36)$$

$$e_{k+1} = -\frac{10b_{k+1} d_{k+1} - 33a_{k+1} b_{k+1} - 10a_{k+1} d_{k+1} v_{g,k+1} + 33a_{k+1}^2 v_{g,k+1}}{22a_{k+1} - 20d_{k+1}} , \quad (5.37)$$

$$f_{\text{H}_2,k+1} = \frac{d_{k+1}}{a_{k+1}} . \quad (5.38)$$

Dabei ist nur die Lösung mit der negativen Wurzel physikalisch sinnvoll.

5.3.2 Randbedingungen

Die Gasströmung soll für das Nachstoßgebiet eines stationären Schocks berechnet werden. Um dies zu bewirken, müssen die hydrodynamischen Variablen unmittelbar nach der Stoßfront bekannt sein. Abbildung 5.4 veranschaulicht die Strömung durch eine Stoßfront. Bei der Durchquerung wird das Gas abgebremst und verdichtet. Diese Kompression führt zu einer Erhöhung der inneren Energie. Das Gas erhitzt sich stark. Weil bei diesem Vorgang Masse, Impuls und Energie des Gases erhalten bleiben müssen, gelten dabei bestimmte Bedingungen, die als Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen bezeichnet werden. Sie geben den Zusammenhang zwischen Dichte, Druck und

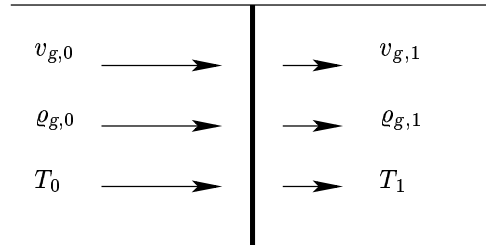


Abbildung 5.4: Die Gasströmung durch die Stoßfront.

Sie geben den Zusammenhang zwischen Dichte, Druck und

Temperatur auf beiden Seiten der Stoßfront an. Sie lauten:⁸

$$\frac{\rho_{g,1}}{\rho_{g,0}} = \frac{(\gamma + 1) M_0^2}{(\gamma + 1) + (\gamma - 1)(M_0^2 - 1)} = \frac{v_{g,0}}{v_{g,1}}, \quad (5.39)$$

$$\frac{p_1}{p_0} = \frac{(\gamma + 1) + 2\gamma(M_0^2 - 1)}{(\gamma + 1)}, \quad (5.40)$$

$$\frac{T_1}{T_0} = \frac{[(\gamma + 1) + 2\gamma(M_0^2 - 1)][(\gamma + 1) + (\gamma - 1)(M_0^2 - 1)]}{(\gamma + 1)^2 M_0^2}, \quad (5.41)$$

$$(5.42)$$

wobei sich der Index 0 auf die Variablen vor der Stoßfront bezieht. Die Werte im Nachstoßgebiet werden durch den Index 1 bezeichnet. Dabei verwendet man den Adiabatenkoeffizienten γ und die Machzahl $M_0 = v_{g,0}/c_{s,0}$, wobei $c_{s,0} = \gamma p_0/\rho_{g,0}$ die adiabatische Schallgeschwindigkeit ist.

Mit Hilfe der Rankine-Hugoniot-Bedingungen werden die Werte der hydrodynamischen Variablen hinter der Diskontinuität aus den Eigenschaften des Gases im Vorstoßgebietes abgeleitet. Das Ergebnis ist von der Schockgeschwindigkeit v_s abhängig. Dabei entspricht v_s der Geschwindigkeitsänderung, die das Gas beim Durchgang durch die Stoßfront erfährt. Die so ermittelten Werte dienen für die orts aufgelösten Rechnungen als Randbedingung. Es ist zu beachten, daß sich diese Betrachtungen auf das Ruhesystem der Stoßfront beziehen. Daher sind alle Gasgeschwindigkeiten relativ zur Diskontinuität zu sehen.

In Abbildung 5.3 ist die Lösung für einen Stoß mit der Schockgeschwindigkeit 150 km s^{-1} dargestellt. Die Stoßwelle dringt in ein Gebiet mit dichtem, kühlem H_2 -Gas ein. In diesem Beispiel wurde die Staubdynamik nicht berücksichtigt. Um die Wirkung des Staubes auf die Hydrodynamik näherungsweise einzubeziehen, wurde die Staubdichte an die des Gases gekoppelt. Dabei wurde ein konstanter Massenanteil von $\rho_d/\rho_g = 0.01$ angenommen. Abbildung 5.3(a) zeigt die Gasdichte in Abhängigkeit von der Entfernung zur Stoßfront. Die Werte beziehen sich dabei auf die Dichte im Vorstoßgebiet. Beim Kreuzen der Diskontinuität wird das Gas etwa um den Faktor 5.7, der durch Gleichung (5.39) vorgegeben ist, komprimiert. Danach sinkt die Dichte leicht, bis sie bei etwa 10^{14} cm sprunghaft ansteigt. Die Ursache dafür liegt an der starken Abkühlung, die das Gas an dieser Stelle erfährt. Die Entwicklung der Temperatur ist in Abbildung 5.3(b) aufgezeigt. Durch den Schock heizt sich das Gas stark auf und kühlt sich in der Folgezeit ab. Durch die Dissoziation des molekularen Wasserstoffs in der unmittelbaren Umgebung der Diskontinuität wird dem Gas viel thermische Energie entzogen. Die starke Abkühlung bei 10^{14} cm wird durch den Einfluß des Staubes verursacht. In Abbildung 5.3(c) ist die Gasgeschwindigkeit dargestellt. Das Gas bewegt sich mit einer Geschwindigkeit

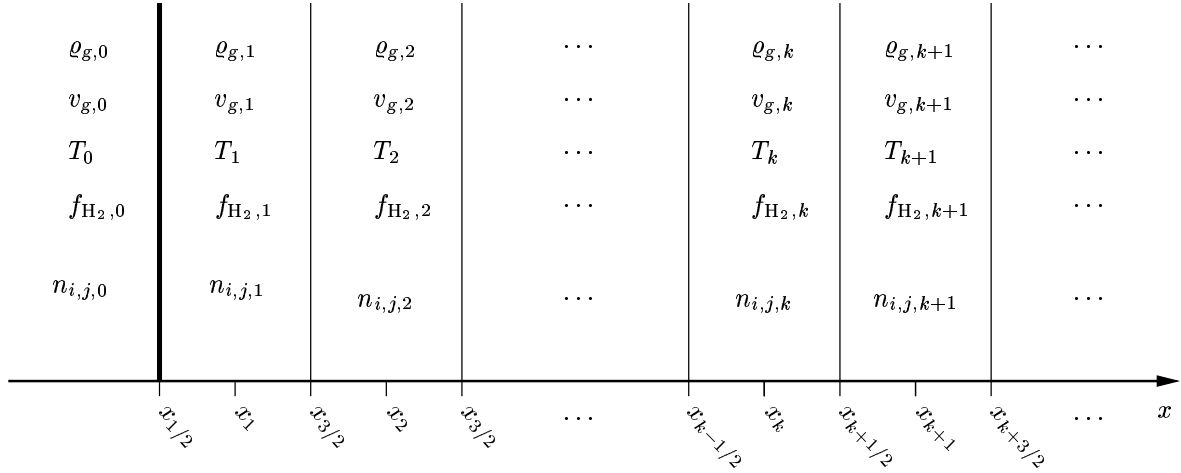
$$v_{g,0} = \frac{v_s}{\left(1 - \frac{\rho_{s,0}}{\rho_{g,1}}\right)} \quad (5.43)$$

auf die Stoßfront zu und wird durch sie auf den Wert

$$v_{g,1} = v_{g,0} \frac{\rho_{g,0}}{\rho_{g,1}} \quad (5.44)$$

abgebremst. Durch die hohe Verdichtung des Gases bei 10^{14} cm kommt es aufgrund der Impulserhaltung zu einer weiteren starken Reduktion der Geschwindigkeit. Abbildung 5.3(d) ist der Dissoziationsgrad des Mediums in Abhängigkeit von der Entfernung zur Diskontinuität dargestellt. Durch die hohen Temperaturen am Anfang werden die Wasserstoffmoleküle sehr schnell zerstört. Innerhalb einer Distanz von 10^{12} cm fällt der Molekülanteil auf null. Erst wenn das Gas vollständig abgekühlt und die Dichte hinreichend hoch ist, bilden sich wieder Moleküle.

⁸Siehe z. B. Shu (1992).^[40]

Abbildung 5.5: Die Struktur des Integrationsgitters in Richtung der x -Koordinate.

5.4 Berechnung des Ortsschritts

In Abbildung 5.5 ist die Struktur des Integrationsgitters in Richtung der x -Koordinate dargestellt. Auf der linken Seite ist das Vorstoßgebiet angedeutet. Es wird von rechts bei $x_{1/2}$ durch die Stoßfront begrenzt. Daran schließt sich rechts das eigentliche Gitter an. Die hydrodynamischen Größen und die Staubteilchendichten sind in den Zentren der Zellen definiert.

Die Skalenlängen, auf denen sich Änderungen in den berechneten Variablen ergeben, werden in der Regel mit zunehmendem Abstand von der Stoßfront größer. Daher werden für die Positionen der Gitterzentren exponentiell wachsende Abstände von der Diskontinuität gewählt. Dafür wird die Beziehung

$$x_{k+1}^{(a)} = 1.025 x_k + x_0 \quad (5.45)$$

mit der Konstante $x_0 = 5 \times 10^7$ cm verwendet. Um auch schnelle Änderungen räumlich auflösen zu können, wird diese Schrittweite durch eine weitere Bedingung nach oben begrenzt.

$$x_{k+1}^{(b)} = x_k + 0.25 \left(10^{(\log x)_{k+1}} - x_k \right). \quad (5.46)$$

Dabei wird als limitierende Eigenschaft die Steigung der Gasdichte benutzt.

$$(\log x)_{k+1} = \log x_k + 10^{-1} \log \varrho_{g,k} \left| \frac{\log \varrho_{g,k} - \log \varrho_{g,k-1}}{\log x_k - \log x_{k-1}} \right|. \quad (5.47)$$

Als Schrittweite wird das Minimum der beiden Gleichungen (5.45) und (5.46) verwendet.

$$x_{k+1} = \min \left(x_{k+1}^{(a)}, x_{k+1}^{(b)} \right). \quad (5.48)$$

Mit Hilfe des Modells sollen stationäre Stoßfronten berechnet werden, die in ein ruhendes Medium eindringen. Das Struktogramm, das in Abbildung 5.6 dargestellt ist, veranschaulicht die Vorgehensweise. Die Bedingungen im Vorstoßgebiet entsprechen denen von dichten Molekülwolken. Das Gas ist dicht und kühl und der Wasserstoff liegt vollständig in molekularer Form vor. Die Gasgeschwindigkeit hängt von der Schockgeschwindigkeit ab und ist durch Gleichung (5.43) gegeben. Die Staubteilchen bewegen sich zusammen mit dem Gas auf die Stoßfront zu. Das Verhältnis von Staub- zu Gasmasse beträgt 0.01, was dem natürlichen Staubanteil entspricht. Die Staubpartikel werden geeignet auf die Massenbins verteilt. Bei der Durchquerung der Stoßfront ändern sich Gasdichte, -temperatur und -geschwindigkeit wie durch die Sprungbedingungen (5.39), (5.40) und (5.41) vorgegeben. Der Molekülanteil bleibt dabei unberührt. Das Gleiche gilt für die Staubverteilung. Mit Hilfe der Gasparameter unmittelbar

nach dem Stoß werden nun die Werte von $\dot{n}_{i,j,k}$ berechnet. Im nächsten Schritt wird die Änderung der Staubverteilung in dem Gas unmittelbar nach dem Stoß mit Hilfe der Gleichungen (5.13), (5.14) und (5.15) ermittelt. Da $\dot{n}_{i,j,k}$ selbst von $n_{i,j,k}$ abhängt, muß diese Berechnung mehrmals iteriert werden. Es zeigt sich, daß sich $\dot{n}_{i,j,k}$ bereits nach der zweiten Iteration nicht mehr wesentlich verändert. Aus diesem Grund wird in den Rechnungen dieser Schritt jeweils zweimal ausgeführt. Dann wird der neue Zellenmittelpunkt x_k bestimmt.

Es werden abwechselnd die hydrodynamischen und die Größen, die die Staubbynamik beschreiben, berechnet. Dabei fließen jeweils die Ergebnisse des vorhergehenden Schrittes in die Berechnung des aktuellen ein. Es ist zu beachten, daß für die Bestimmung der hydrodynamischen Variablen die Staubverteilung aus der vorherigen Gitterzelle verwendet wird. Dies ist gerechtfertigt, weil sich die Staubverteilung viel langsamer ändert, als das Gas. Diese Vorgehensweise hat den Vorteil, daß die Hydrodynamik bei der Iteration nicht berücksichtigt werden muß. Dadurch wird der Rechenaufwand erheblich reduziert.

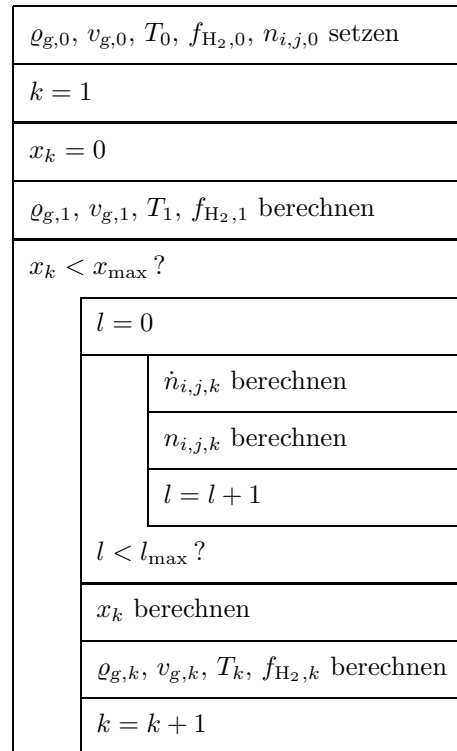


Abbildung 5.6: Struktogramm zur Berechnung des Ortschritts.

6 Chemische und physikalische Prozesse

In den vorausgehenden Abschnitten wurde das numerische Modell beschrieben. Die physikalischen Aspekte wurden dabei jedoch vernachlässigt. Sie werden in den folgenden Abschnitten besprochen.

6.1 Zusammensetzung des Gases

Das Gas besteht aus einer Mischung von atomaren und molekularem Wasserstoff in einem Verhältnis, das sich durch Dissoziation und Reassoziaton mit der Zeit verändern kann. Die Häufigkeit der beiden Komponenten wird durch den Molekülanteil f_{H_2} beschrieben.

$$n(\text{H}_2) = f_{\text{H}_2} n_p, \quad (6.1)$$

$$n(\text{H}) = (1 - 2f_{\text{H}_2}) n_p. \quad (6.2)$$

Dabei ist n_p die Teilchendichte der Wasserstoffkerne. Daneben enthält das Medium eine feste Beimengung von Helium.

$$n(\text{He}) = 0.1 n_p. \quad (6.3)$$

Damit ergibt sich für den Zusammenhang von Gasdichte und Wasserstoffkerndichte

$$n_p = \frac{\varrho_g}{1.4 m_{\text{H}}}. \quad (6.4)$$

Ist der Dissoziationsgrad bekannt, können die Materialeigenschaften wie die spezifische Wärmekapazität und das mittlere Atomgewicht des Gases berechnet werden.

$$c_V = \mathcal{R} \frac{3.3 - f_{\text{H}_2}}{2.8}, \quad (6.5)$$

$$\mu = \frac{1.4}{1.1 - f_{\text{H}_2}}. \quad (6.6)$$

Diese Materialgleichungen werden benötigt, um das Gleichungssystem der hydrodynamischen Gleichungen zu lösen. Die genauen Rechnungen hierfür werden von Suttner (1996)^[47] angegeben.

6.2 Chemische Reaktionen

Durch die Zerstörung und Bildung von Wasserstoffmolekülen ändert sich die Zusammensetzung des Gases. Dieser Prozeß wird durch die Quellterme der Dissoziation D und Reassoziaton R in Gleichung (5.21) beschrieben. Sie besitzen folgende Gestalt:

$$D(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T) = n(\text{H}_2)^2 k_D^{\text{H}_2}(T) + n(\text{H}) n(\text{H}_2) k_D^{\text{H}}(T), \quad (6.7)$$

$$R(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T) = n(\text{H}) n k_R(T). \quad (6.8)$$

Für die Ratenkoeffizienten aus dem Dissoziationsterm wird eine Formel verwendet, die von Suttner (1997)^[48] angegeben wird. Sie basiert auf den Ergebnissen früherer Arbeiten von Shapiro und Kang (1987)^[38] sowie Lepp und Shull (1983).^[29] Dabei werden Terme für hohe und niedrige Gasdichten, gekennzeichnet durch die Indizes h und l , mit Hilfe einer kritischen Dichte n_{cr} interpoliert:

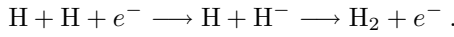
$$\log \left(k_D^{\text{H},\text{H}_2} \right) = \log k_h^{\text{H},\text{H}_2}(T) - \log \left(\frac{k_h^{\text{H},\text{H}_2}(T)}{k_l^{\text{H},\text{H}_2}(T)} \right) \left(1 + \frac{n_p}{n_{cr}} \right)^{-1}. \quad (6.9)$$

Während die Koeffizienten k^H aus Stößen von H_2 -Molekülen mit H-Atomen resultieren, stammen die Koeffizienten k^{H_2} aus Kollisionen von H_2 -Molekülen untereinander.

Für den Quellterm der Reassoziaton wird Gleichung (2.5) aus Kapitel 2.2 verwendet. Weil das Ensemble der Staubteilchen von Staubkörnern unterschiedlicher Größen gebildet wird, ergibt sich der Term durch die Summation über alle Staubkomponenten.

$$\begin{aligned}
R(\varrho_g, f_{H_2}, T) &= \sum_{i=1}^N R_i \\
&= n(H) \sum_{i=1}^N n_i \pi a_i^2 \langle Sv \rangle f_a \\
&= \sqrt{\frac{8 k_B T}{\pi \mu_{mH}}} \frac{n(H) f_a \pi}{1 + 4 \times 10^{-2} \left(\frac{T+T_d}{K}\right)^{1/2} + 2 \times 10^{-3} \left(\frac{T}{K}\right) + 8 \times 10^{-6} \left(\frac{T}{K}\right)^2} \sum_{i=1}^N n_i a_i^2 \\
&= \frac{n(H)}{\mu^{1/2}} \sqrt{\frac{8 \pi k_B}{m_H}} \frac{f_a \sqrt{T}}{1 + 4 \times 10^{-2} \left(\frac{T+T_d}{K}\right)^{1/2} + 2 \times 10^{-3} \left(\frac{T}{K}\right) + 8 \times 10^{-6} \left(\frac{T}{K}\right)^2} \sum_{i=1}^N n_i a_i^2 \\
&= \frac{n(H)}{\mu^{1/2}} \frac{4.55 \times 10^4 \text{ cm s}^{-1} \text{ K}^{-1/2} f_a \sqrt{T}}{1 + 4 \times 10^{-2} \left(\frac{T+T_d}{K}\right)^{1/2} + 2 \times 10^{-3} \left(\frac{T}{K}\right) + 8 \times 10^{-6} \left(\frac{T}{K}\right)^2} \sum_{i=1}^N n_i a_i^2. \quad (6.10)
\end{aligned}$$

Daneben besteht die Möglichkeit der Molekülbildung durch die Reaktion mit freien Elektronen.



In der Abwesenheit von Staub kann sie laut Black (1978)^[2] wesentlich zur Erzeugung von molekularem Wasserstoff beitragen. Wegen der mangelnden Information über die Elektronendichte bleibt dieser Prozeß unberücksichtigt.

6.3 Kühlung

Die verwendete Kühlfunktion setzt sich aus verschiedenen Mechanismen zusammen, die zur Abkühlung des Gases führen.

$$\Lambda(T, \varrho_g, f_{H_2}) = \Lambda_{H_2} + \Lambda_{Diss} + \Lambda_{Atom} + \Lambda_{Staub} . \quad (6.11)$$

Die einzelnen Beiträge sind die Kühlung durch Linienstrahlung aus gemischten Rotations- und Vibrationsübergängen des Wasserstoffmoleküls Λ_{H_2} , die Dissoziationskühlung Λ_{Diss} , Kühlung durch atomare Linienstrahlung Λ_{Atom} und die Staubkühlung Λ_{Staub} . Die einzelnen Prozesse werden im Folgenden kurz erläutert. Eine detaillierte Beschreibung findet sich bei Suttner (1996).^[47]

Die Wasserstoffkühlungsfunktion beschreibt den Energieverlust durch Linienstrahlung, die aus kombinierten Rotations- und Vibrationsübergängen des H_2 -Moleküls resultiert. In dem Modell wird eine Näherung verwendet, die von Suttner (1996)^[47] angegeben wird.

$$\Lambda_{H_2} = n(H_2) \left(\frac{L_{vh}}{1 + \frac{L_{vh}}{L_{vl}}} + \frac{L_{rh}}{1 + \frac{L_{rh}}{L_{rl}}} \right) . \quad (6.12)$$

Der Term ist eine analytische Anpassung an die Ergebnisse numerischer Rechnungen von Lepp und Shull (1983).^[29]

Durch Stöße können Wasserstoffmoleküle zerstört werden. Die thermische Energie des Gases wird dabei um den zur Dissoziation notwendigen Betrag verringert. Insgesamt kann dieser Prozeß quantitativ

durch den Ausdruck

$$\Lambda_{Diss} = E_B D(\rho_g, f_{H_2}, T) \quad (6.13)$$

beschrieben werden. Dabei ist $E_B = 4.476 \text{ eV}$ die Bindungsenergie eines Wasserstoffmoleküls.

Die Kühlung durch atomare Linienstrahlung wird näherungsweise behandelt. Der Kühlungsterm

$$\Lambda_{Atom} = n(H)^2 \lambda(T) \quad (6.14)$$

beruht auf numerischen Rechnungen von Cox und Tucker (1969)^[6] sowie Kafatos (1973).^[24]

Der Einfluß des Staubes auf die innere Energie des Gases wurde in Abschnitt 2.1 diskutiert. Dort wurde davon ausgegangen, daß alle Staubpartikel die gleichen Eigenschaften besitzen. Besteht das Staubteilchenensemble dagegen aus unterschiedlichen Partikeln mit eigenen Geschwindigkeiten, muß der in Gleichung (2.4) beschriebene Kühl- bzw. Heizterm durch die Summation über alle Staubkomponenten gewonnen werden. Es ergibt sich daher

$$\Lambda_d = \sum_{i=1}^N \Lambda_i = \pi n_g k_B (T - T_d) \sum_{i=1}^N n_i a_i^2 (v_{th} - \Delta v_i) . \quad (6.15)$$

6.4 Ionisationszustand des Gases

Für die quantitative Beschreibung verschiedener Wechselwirkungen zwischen Staub und Gas, wie die Coulombkopplung oder das Sputtering, sind genaue Kenntnisse über den Ionisationszustand des Mediums notwendig. Da das verwendete physikalische Modell diese Informationen nicht liefert, wird der Ionisationsgrad mit Hilfe einer Gleichgewichtslösung abgeschätzt. Der Ionenanteil einer bestimmten Atomsorte in Abhängigkeit von der Temperatur wird mit dem Verhältnis der Zahl der positiven Atomrümpfen zur Gesamtmenge an Atomen in einem reinen Wasserstoffgas abgeschätzt.

$$f_i(T) = \frac{n(H^+)}{n(H) + n(H^+)} = \frac{\alpha_I(T)}{\alpha_I(T) + \alpha_R(T)} . \quad (6.16)$$

Die Abschätzung, die bei den Rechnungen angewendet wurde und die dabei verwendeten Raten für Ionisation $\alpha_I(T)$ und Rekombination $\alpha_R(T)$ werden in Anhang A beschrieben.

Das Verwenden einer dynamischen Gleichgewichtslösung ist gerechtfertigt, wenn das Gas nach dem Stoß den Gleichgewichtszustand hinreichend schnell erreicht. Für große Schockgeschwindigkeiten ($v_s \gtrsim 50 \text{ km s}^{-1}$) ist dies der Fall.⁹

⁹Siehe dazu Anhang A.

7 Ergebnisse der Rechnungen mit Ortsauflösung

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse aus ortsaufgelösten Rechnungen beschrieben und diskutiert. Für die Rechnung wurde jeweils das folgende Szenario angenommen. Eine starke Stoßwelle dringt in ein ruhendes gasförmiges Medium ein. Die Parameter des Gases im Vorstoßgebiet wurde in allen Rechnungen gleich gewählt. Der Wasserstoff liegt vollständig in Form von Molekülen vor. Das Gas besitzt eine Dichte von $\varrho_g = 2.3 \times 10^{-20} \text{ g cm}^{-3}$ und eine Temperatur von $T = 10 \text{ K}$. Dies entspricht dem Zustand in einer dichten Molekülwolke. Die Hydrodynamik und die dynamischen Staubprozesse werden für das Nachstoßgebiet, wie in den vorherigen Kapiteln beschrieben, für verschiedene Schockgeschwindigkeiten berechnet. Dabei werden die Anfangsbedingungen mit Hilfe der Rankine-Hugoniot-Sprungbedingungen aus dem Zustand des Mediums vor dem Stoß abgeleitet.

Abbildung 7.1 (a) ist das Ergebnis für einen Stoß mit der Geschwindigkeit $v_s = 250 \text{ km s}^{-1}$ dargestellt. Der Staub ist hier lediglich an das Gas gekoppelt; Zerstörungsmechanismen wurden in diesem Beispiel nicht berücksichtigt. Als Staubmaterial wurde Silikat gewählt. Der Plot zeigt die Besetzung der einzelnen Massenbins in Abhängigkeit von der Entfernung zur Stoßfront. Die einzelnen Teilchendichten wurden dabei durch die Summation über die dazugehörigen Geschwindigkeitsbins berechnet.

$$n_i(x) = \sum_j n_{i,j}(x) . \quad (7.1)$$

Die Massenbins decken ein Intervall von 10^{-20} g bis 10^{-11} g ab.

Die Staubpartikel genügen zunächst der MRN-Verteilung. Die Partikel werden nach dem Kreuzen der Stoßfront mit wachsender Masse sukzessive beschleunigt, was zu einer Verdichtung der Teilchen um einen Faktor von etwa 5.7 führt. Dies äußert sich in einer wellenförmigen Struktur in der geplotteten Oberfläche von Abbildung 7.1 (a). Bei etwa 10^{15} cm führt die starke Abkühlung des Gases¹⁰ zu einer weiteren Kompression des Staubes um mehrere Größenordnungen.

Abbildung 7.1 (b) zeigt das Ergebnis der gleichen Rechnung unter Berücksichtigung aller Zerstörungsmechanismen. Nach der anfänglichen Verdichtung ist ein deutlicher Einbruch der Teilchendichten erkennbar. Nach der abschließenden Kompression kommen die dynamischen Staubprozesse zum Stillstand. Die Staubpartikel bewegen sich nun mit dem Gas und es kommt zu keiner weiteren Abtragung von Material. Der Vergleich mit Abbildung 7.1 (a) offenbart, daß ein erheblicher Teil des Staubes verdampft wurde. Die mittleren Massenbins sind dabei überdurchschnittlich betroffen.

In Abbildung 7.1 (c) zeigt die Staubmassendichte in Abhängigkeit von der Entfernung zur Stoßfront. Dazu wurden die in Abbildung 7.1 (a) geplotteten Partikeldichten über alle Massenbins integriert.

$$\varrho_d(x) = \sum_i n_i(x) m_i . \quad (7.2)$$

Die zweite Kurve stellt zum Vergleich die Massendichte des Gases dar. Die Angabe der Dichten beziehen sich dabei jeweils auf die Werte im Vorstoßgebiet. Während das Gas durch den Stoß instantan komprimiert wird, reagiert der Staub träge und benötigt für diesen Vorgang etwa 10^{14} cm . Da in diesem Beispiel Staubzerstörungsprozesse ausgeklammert sind, liegen ab diesem Punkt beide Kurven übereinander.

Ganz anders im zweiten Beispiel, das in Abbildung 7.1 (d) dargestellt ist. Auch hier wird der Staub zu Beginn komprimiert. Die Zerstörung von Staubpartikeln sorgt in diesem Fall für eine Abnahme der Massendichte. Wegen des Verlusts an Staubmaterial kommt es hier nicht mehr zur Deckung beider Kurven. Da das Verhältnis von Staub- zu Gasmasse am Anfang der Rechnung bekannt ist, kann man aus den Massedichten nach dem Eintritt des Gleichgewichts auf die Staubmasse schließen, die vernichtet wurde.

Die Abbildungen 7.2 (a) und 7.2 (b) zeigen die Ergebnisse für einen Stoß mit der kleineren Schockgeschwindigkeit von $v_s = 100 \text{ km s}^{-1}$. Ohne die Berechnung von Zerstörungsprozessen bleibt das Staub-

¹⁰Siehe Abbildung 5.3.

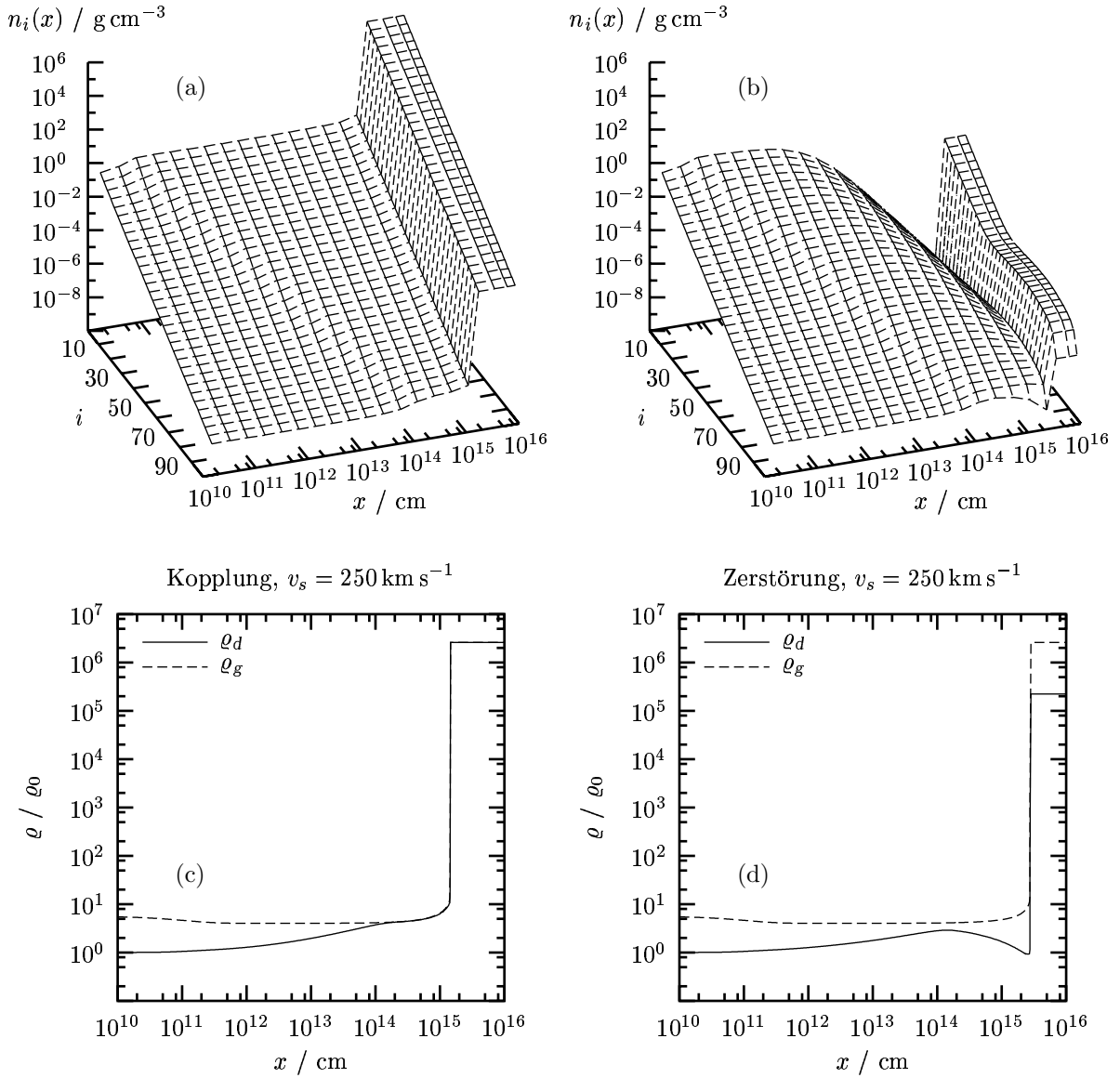


Abbildung 7.1: Die Teilchendichten in den einzelnen Massenintervallen nach Gleichung (7.1) in Abhängigkeit von der Entfernung zur Stoßfront. Die Plots wurden für Silikatpartikel und eine Schockgeschwindigkeit $v_s = 250 \text{ km s}^{-1}$ berechnet. Die Beispiele zeigen die beiden Fälle, daß (a) der Staub nur an das Gas gekoppelt ist und daß (b) zusätzlich die besprochenen Zerstörungsmechanismen berücksichtigt wurden. Die dazugehörigen Massendichten gemäß Gleichung (7.2) sind in (c) und (d) als Funktion des Abstandes von der Stoßfront dargestellt. Zum Vergleich sind auch die Massendichten des Gases abgebildet. Die Dichten sind auf die jeweiligen Werte vor dem Stoß bezogen.

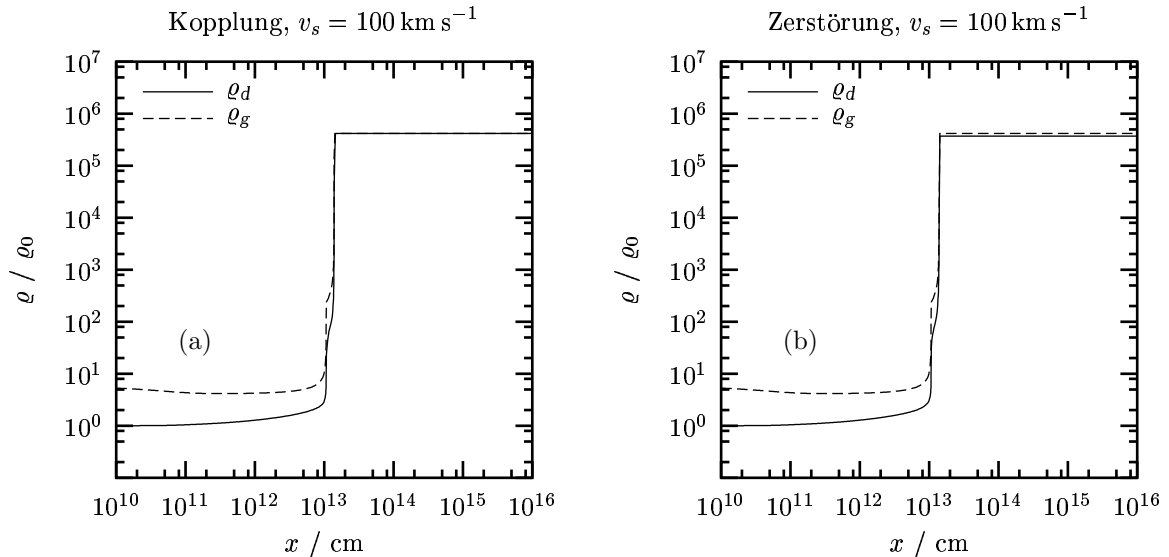


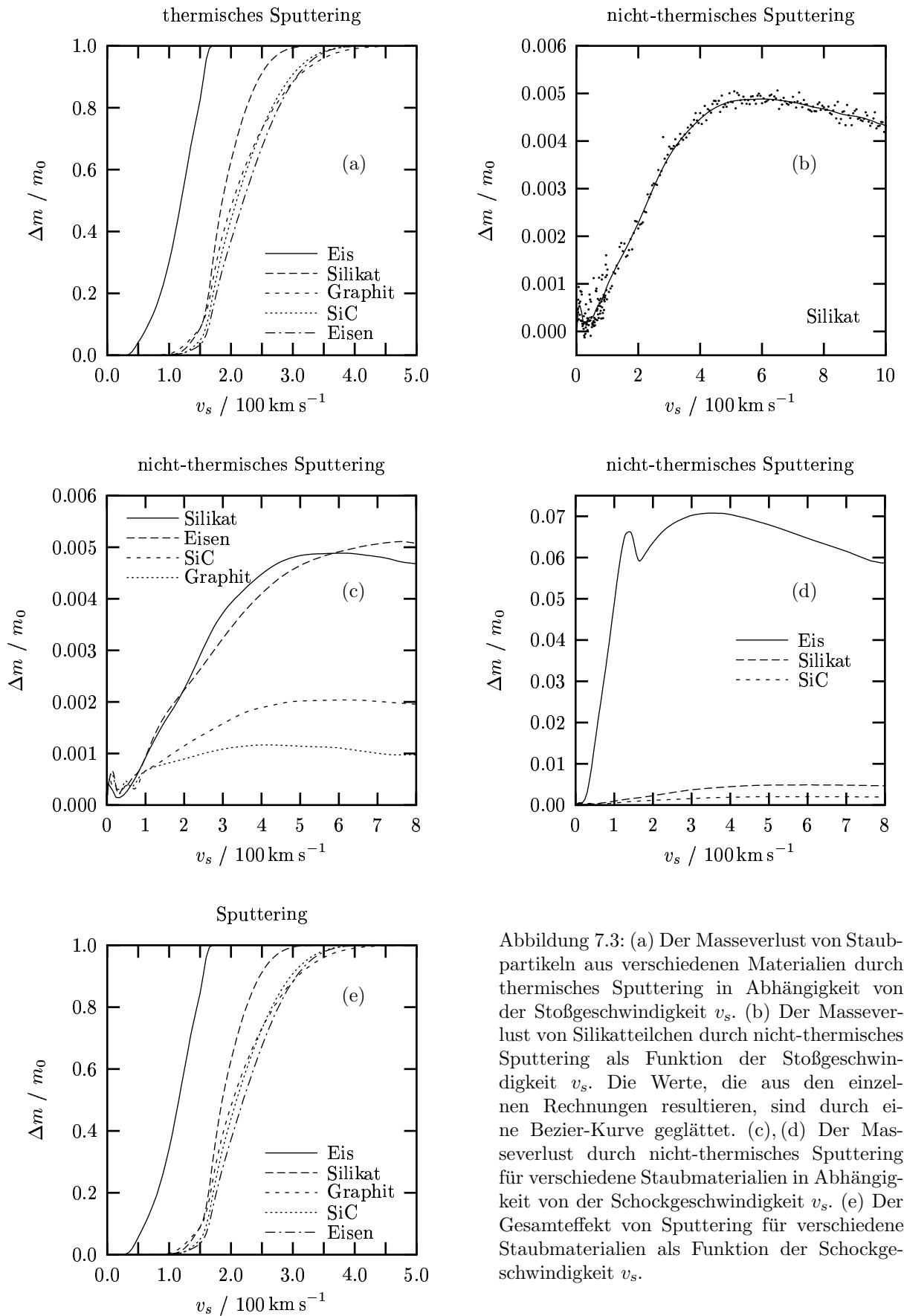
Abbildung 7.2: Die Massendichte von Silikatpartikeln in Abhängigkeit von der Entfernung von der Stoßfront bei einer Schockgeschwindigkeit von $v_s = 100 \text{ km s}^{-1}$. Die Plots zeigen die Fälle, (a) daß der Staub lediglich an das Gas gekoppelt ist und (b) daß der Staub zusätzlich destruktiven Prozessen ausgesetzt ist. Zum Vergleich sind die Gasdichten aufgezeichnet. Alle Dichten sind auf die jeweiligen Werte vor dem Stoß bezogen.

Gasmassen-Verhältnis wiederum unverändert. Wegen der kleineren Stärke des Schocks ergibt sich bei der Einbeziehung von Staubzerstörung ein geringerer Materialverlust.

7.1 Sputtering

Um den Masseverlust zu bestimmen, der im Nachstoßgebiet einer Schockwelle durch thermisches Sputtering verursacht wird, wurde die Staubdynamik für verschieden starke Stöße berechnet. Dabei wurde die gesamte abgetragene Masse, wie oben beschrieben, abgeleitet. Es wurden verschiedene Staubmaterialien untersucht. In Abbildung 7.3(a) ist der auf die Ausgangsmasse des Staubes bezogene Masseverlust in Abhängigkeit von der Schockgeschwindigkeit aufgetragen. Zunächst sind Teilchen aus Eis aufgrund der äußerst niedrigen Oberflächenbindungsenergie vom Sputtering betroffen. Ab einer Geschwindigkeit von etwa $v_s \approx 40 \text{ km s}^{-1}$ erleiden sie einen merklichen Masseverlust. Bei $v_s \approx 170 \text{ km s}^{-1}$ sind alle Eispartikel nahezu komplett zerstört. Bei den anderen Materialien tritt thermisches Sputtering erst ab einer Geschwindigkeit von $v_s \approx 100 \text{ km s}^{-1}$ ein. Zunächst zeigt sich ein flacher Anstieg des Masseverlusts, der zunehmend steiler wird und am Ende wieder abnimmt. Die Vernichtung von Silikatstaub geht dabei am schnellsten vonstatten. Bei einer Geschwindigkeit von $v_s \approx 320 \text{ km s}^{-1}$ ist er vollständig abgetragen. Dies tritt für Staubpartikel, die aus den übrigen Materialien aufgebaut sind, erst bei Schockgeschwindigkeiten über $v_s \gtrsim 420 \text{ km s}^{-1}$ auf.

Wegen der Kopplung ist die Dauer der Wirkung bei nicht-thermischem Sputtering begrenzt. Der Masseverlust fällt daher im Vergleich zum thermischen Sputtering erheblich geringer aus. In Abbildung 7.3 (b) ist der durch nicht-thermisches Sputtering verursachte Masseverlust von Silikatpartikeln in Abhängigkeit von der Schockgeschwindigkeit dargestellt. Die Meßpunkte zeigen die Ergebnisse der einzelnen Rechnungen. Die berechneten Verluste sind so gering, daß die Daten durch ein deutliches „Rauschen“ überlagert werden. Aus diesem Grund werden die Ergebnisse durch Bezier-Kurven approximiert. Die durchgezogene



Linie im Plot zeigt die auf diese Weise geglätteten Werte.

In Abbildung 7.3(c) sind die Massenverluste von Silikat-, Eisen-, SiC- und Graphitpartikeln aufgetragen. Sie liegen durchweg deutlich unter einem Prozent. Lediglich der Masseverlust von Eis, der in Abbildung 7.3(d) geplottet ist, liefert einen nennenswerten Beitrag. Der Verlust wächst zunächst bei allen Materialien mit der Schockgeschwindigkeit. Die sinkende Effektivität von Sputtering bei großen Geschwindigkeiten bedingt ein Maximum in den Kurven. Das Maximum, das der Masseverlust von Eis bei $v_s = 130 \text{ km s}^{-1}$ aufweist, ist eine Folge des Minimums in der Kopplung von Staub und Gas.

Im Vergleich zum thermischen Sputtering ist nicht-thermisches Sputtering zu vernachlässigen. Abbildung 7.3(e) zeigt den Gesamteffekt beider Prozesse. Nur in der Kurve für Eispartikel ist ein minimaler Unterschied zu Abbildung 7.3(a) zu erkennen.

7.2 Streuprozesse

Durch den Shatteringprozeß werden neue Teilchen produziert, die Massendichte des Staubes bleibt dabei erhalten. Aus diesem Grund soll zunächst die Änderung der Teilchenzahl durch eine Stoßwelle näher beleuchtet werden.

Um die Auswirkung des Shatterings zu veranschaulichen, wird zunächst eine Stoßwelle untersucht, bei deren Berechnung die Streuung von Staubpartikeln aneinander vernachlässigt wurde. Abbildung 7.4(a) zeigt die Entwicklung der Teilchendichte im Vergleich zur Massendichte von Silikatstaub hinter einer Stoßfront mit der Schockgeschwindigkeit $v_s = 100 \text{ km s}^{-1}$. Da die Staubkörner zu Beginn der MRN-Verteilung genügen, liegt der größte Teil der Staubmasse in Form kleiner Teilchen vor. Diese können von dem umgebenden Medium verhältnismäßig leicht beschleunigt werden. Daher kann die Teilchendichte die anfängliche Kompression, die das Gas durch den Stoß erleidet, schneller nachvollziehen als die Staubmassendichte. In Abbildung 7.1(d) wurde bereits die Gasdichte für den gleichen Schock geplottet. Der Vergleich mit diesem Ergebnis zeigt, daß die Verdichtung jetzt früher, bereits nach etwa $2 \times 10^{11} \text{ cm}$ eintritt. Da in diesem Beispiel keine Streuprozesse berücksichtigt wurden, haben Massen- und Teilchendichte, die jeweils auf ihre Werte im Vorstoßgebiet bezogen sind, nach dem Erreichen des Gleichgewichts den gleichen Wert.

In Abbildung 7.4(b) ist das Ergebnis für den gleichen Stoß unter Einbeziehung von Shattering dargestellt. Im Zuge der Partikelkollisionen werden hier neue Staubteilchen produziert. Wie bereits das Studium des Staubmodells ohne Ortsauflösung gezeigt hat, ist auch hier die Auswirkung der Fragmentation nicht besonders groß. Durch die räumliche Verteilung der Partikel kommt es in diesem Fall jedoch zu einem signifikanten Effekt. Durch die gute Kopplung der leichten Staubteilchen an das Gas verdichten sich diese unmittelbar hinter der Stoßfront. Dies bedingt eine Vielzahl von Zusammenstößen in diesem Gebiet. Der Vergleich der Teilchen- mit der Massendichte nach dem Erreichen des Gleichgewichts offenbart, daß durch die Streuprozesse des Staubs nach dem Stoß neue Staubpartikel erzeugt wurden.

Die Abbildungen 7.4(c) und 7.4(d) zeigen den durch Shattering verursachten Gewinn an Teilchen. Die Teilchendichten, die sich nach dem Erreichen des Gleichgewichts einstellen, sind hier in Abhängigkeit von der Stoßgeschwindigkeit der Schockwelle aufgetragen. Die einzelnen Kurven geben das Ergebnis für verschiedene Staubmaterialien wieder. Die aufgetragenen Teilchendichten sind dabei jeweils auf die Ausgangswerte vor dem Stoß bezogen.

Alle Kurven weisen in der Umgebung von $v_s \approx 100 \text{ km s}^{-1}$ ein Maximum auf, das sich auf die minimale Kopplung zwischen Gas und Staub bei mittleren Geschwindigkeiten zurückführen läßt. Mit steigenden Stoßgeschwindigkeiten beobachtet man ein Anwachsen der Teilchenproduktion. Die Zunahme liegt dabei stets deutlich unterhalb einer Größenordnung. Sie ist am stärksten bei Eispartikeln, bei denen sich die Teilchendichte im Maximum etwa verdreifacht. Für die übrigen Materialien fällt die Teilchenproduktion deutlich niedriger aus.

Durch Shattering vergrößert sich die Zahl der Staubpartikel. Die Staubmassendichte bleibt dabei unverändert. Erst durch die Berücksichtigung von Vaporisation kann Staub im Zuge von Staub-Staub-

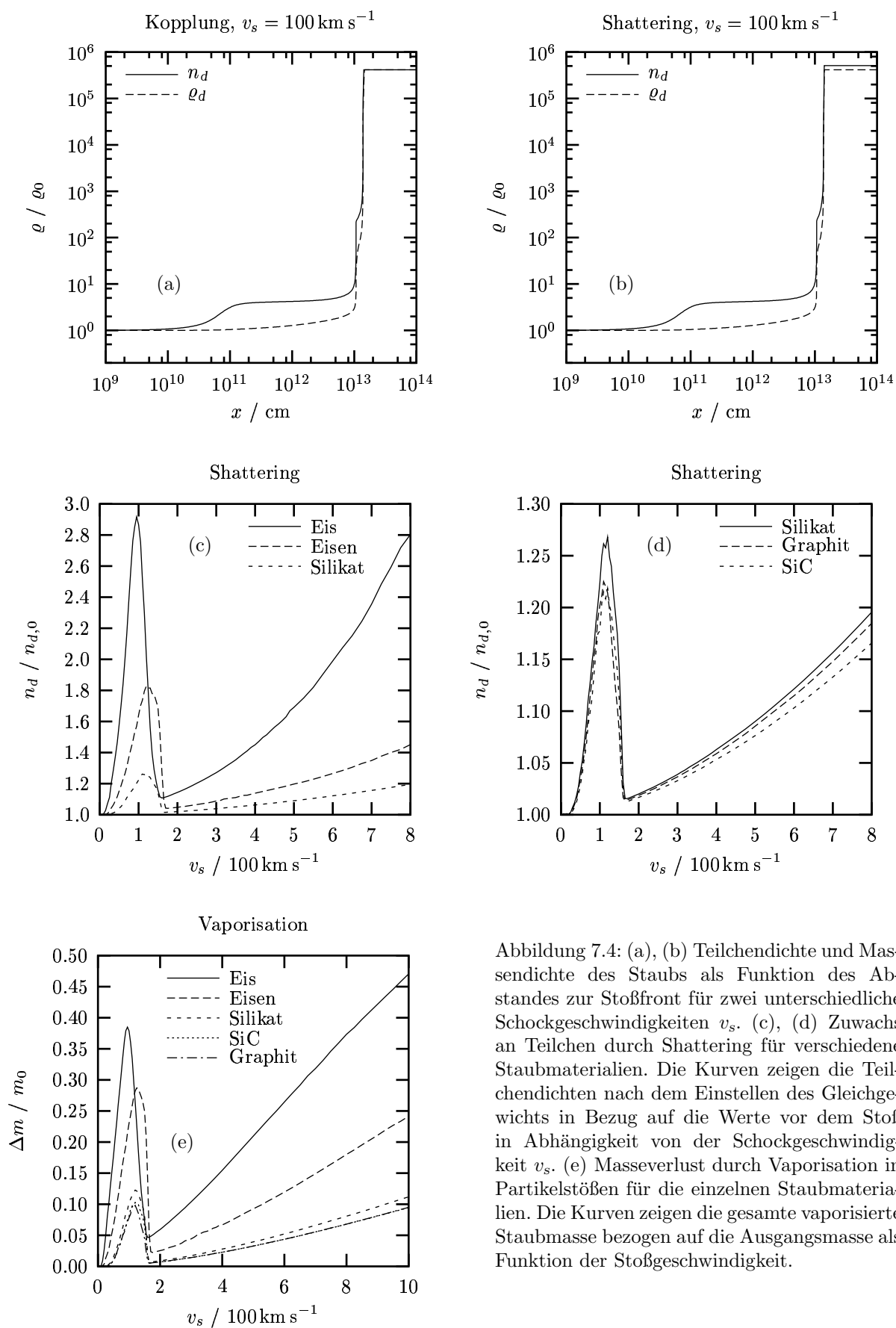


Abbildung 7.4: (a), (b) Teilchendichte und Mas-
sendichte des Staubs als Funktion des Ab-
standes zur Stoßfront für zwei unterschiedliche
Schockgeschwindigkeiten v_s . (c), (d) Zuwachs
an Teilchen durch Shattering für verschiedene
Staubmaterialien. Die Kurven zeigen die Teil-
chendichten nach dem Einstellen des Gleichge-
wichts in Bezug auf die Werte vor dem Stoß
in Abhängigkeit von der Schockgeschwin-
digkeit v_s . (e) Masseverlust durch Vaporisation
in Partikelstößen für die einzelnen Staubma-
terialien. Die Kurven zeigen die gesamte vaporisierte
Staubmasse bezogen auf die Ausgangsmasse als
Funktion der Stoßgeschwindigkeit.

Streuung zerstört werden. Abbildung 7.4(e) zeigt den Anteil der verdampften Staubmasse $\Delta m/m_0$ in Abhängigkeit von der Schockgeschwindigkeit. Dabei wurden sowohl Shattering als auch Vaporisation berechnet. Der Quotient aus den Massen wird mit Hilfe von Gleichung (7.2) definiert.

$$\frac{\Delta m}{m_0} = \frac{\varrho_d(0) - \varrho_d(x)}{\varrho_d(0)}. \quad (7.3)$$

Für die Massendichte des Staubes $\varrho_d(x)$ wird jeweils der Wert, der sich nach dem Erreichen des Gleichgewichtszustandes einstellt, eingesetzt.

Bei allen untersuchten Materialien zeigt sich bei Schockgeschwindigkeiten im Bereich bis 200 km s^{-1} ein Maximum für den vaporisierten Anteil der Masse. Genau wie bei reinem Shattering ist dieser auf die geringere Staub-Gas-Kopplung in diesem Intervall zurückzuführen. Bei höheren Geschwindigkeiten ist ebenfalls eine Zunahme der Vaporisation zu verzeichnen. Dabei ist die Auswirkung auf Eis- und Eisenpartikel am größten. Der abgetragene Massenanteil von Eis beträgt im Maximum bei niedrigen Geschwindigkeiten etwa 40 Prozent, der von Eisen etwa 30 Prozent. Die Werte der anderen Materialien liegen dagegen nur bei ungefähr 10 Prozent. Während der Effekt bei Eisteilchen auf die kleine Oberflächenbindungsenergie zurückzuführen ist, ist bei Eisenteilchen der Grund in der hohen Massendichte des Materials zu suchen. Bei der Kollision zweier Partikel wird hier bei gleicher Größe und gleicher Relativgeschwindigkeit mehr Energie thermalisiert als bei Stoffen mit geringerer Dichte.

7.3 Gesamteffekt

In Abbildung 7.6 ist der gesamte Masseverlust in Abhängigkeit von der Stoßgeschwindigkeit aufgetragen, der sich bei der Berücksichtigung aller besprochenen Zerstörungsmechanismen ergibt. Zum Vergleich sind in Abbildung 7.5 die Masseverluste, aufgeteilt nach den einzelnen Zerstörungsmechanismen, für die untersuchten Staubmaterialien aufgezeichnet.

Bei hohen Stoßgeschwindigkeiten ist thermisches Sputtering der bestimmende Mechanismus. Er führt im Extremfall zur vollständigen Zerstörung der Staubpartikel. Die dafür benötigte Schockgeschwindigkeit ist dabei vom Material der Staubpartikel abhängig. Sie liegt bei den untersuchten Materialien etwa zwischen 300 und 450 km s^{-1} . Bei Eispartikeln führt schon eine verhältnismäßig niedrige Geschwindigkeit von etwa $v_s \approx 150 \text{ km s}^{-1}$ zur kompletten Abtragung der Staubteilchen. Nicht-thermisches Sputtering spielt dagegen keine Rolle. Bei Geschwindigkeiten unterhalb von $v_s \approx 150 \text{ km s}^{-1}$ dominiert die Vaporisation durch Partikelstöße. Dabei wird im Extremfall etwa 10 Prozent der Staubmasse abgetragen. Nur für Eis- und Eisenpartikel ergeben sich höhere Abtragungsraten. Aufgrund der abnehmenden Effektivität der Vaporisation bei hohen Stoßgeschwindigkeiten ergibt sich für Eisenteilchen dabei ein Maximum bei etwa $v_s \approx 120 \text{ km s}^{-1}$.

Das Shattering führt selbst nicht zu einer Zerstörung von Staubmaterial, wohl aber zu einer Erhöhung der Staubpartikeldichte. Obwohl sich die Größenverteilung der Staubteilchen dadurch verändert, wird der

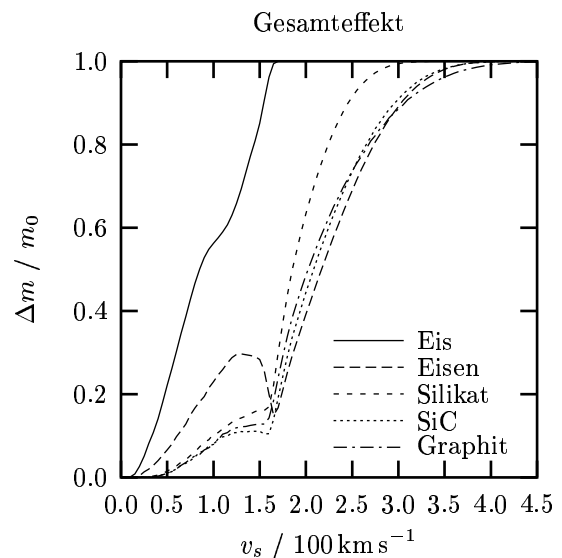


Abbildung 7.6: Der Masseverlust der sich bei der Berücksichtigung von thermischem und nicht-thermischem Sputtering, Vaporisation und Shattering in Abhängigkeit der Schockgeschwindigkeit für die verschiedenen Staubmaterialien einstellt.

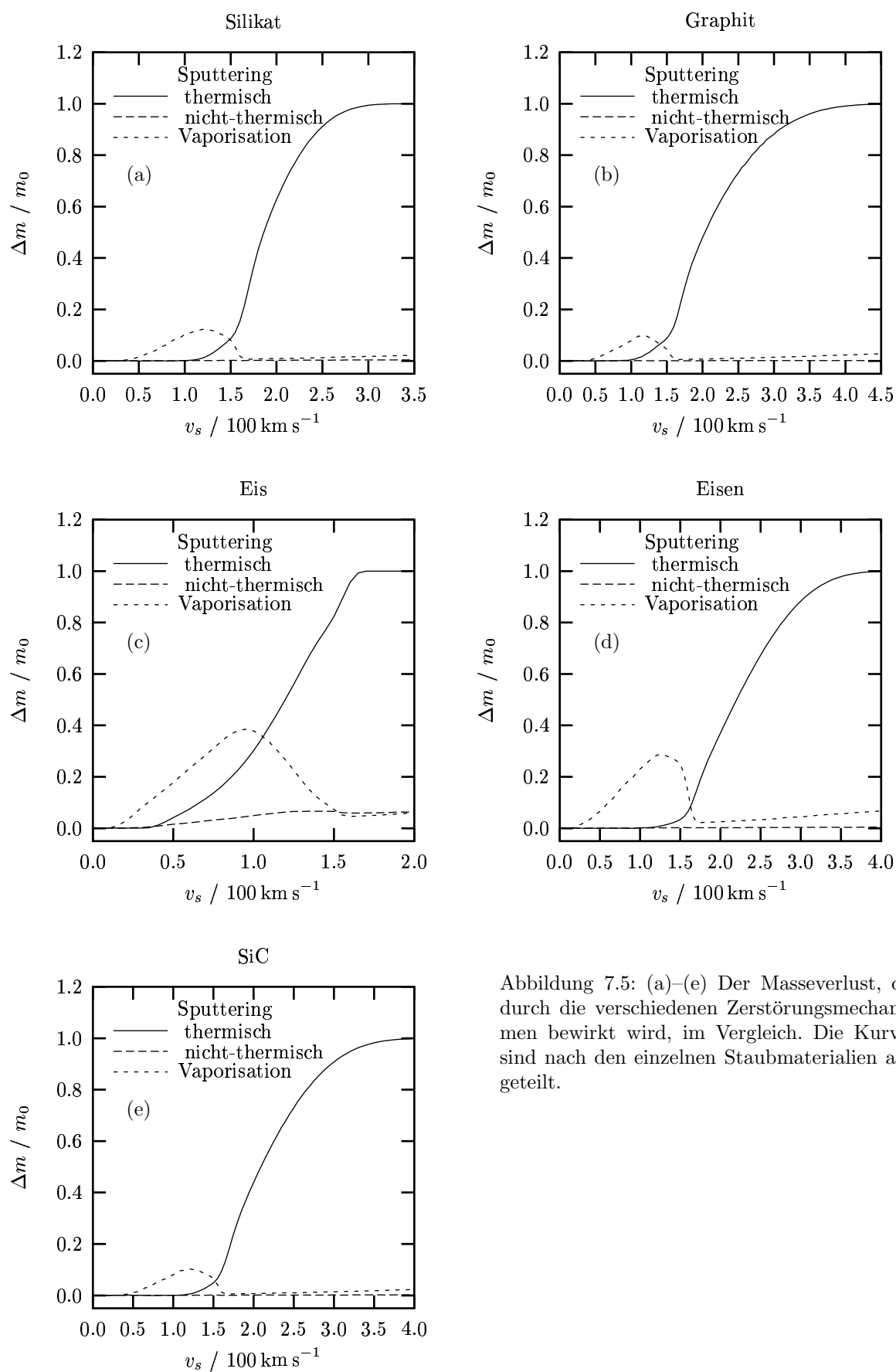


Abbildung 7.5: (a)–(e) Der Masseverlust, der durch die verschiedenen Zerstörungsmechanismen bewirkt wird, im Vergleich. Die Kurven sind nach den einzelnen Staubmaterialien aufgeteilt.

durch Vaporisation verursachte Masseverlust nur unwesentlich beeinflusst. Dies wird durch den Vergleich der Kurve für Vaporisation in Abbildung 7.5 (d) mit der entsprechenden Kurve in Abbildung 7.6 deutlich. Beide zeigen den Masseverlust von Eisenpartikeln, der sich allein durch Vaporisation sowie unter gleichzeitiger Berücksichtigung aller Zerstörungsmechanismen ergibt. Im Bereich bis 150 km s^{-1} , der von der Vaporisation dominiert wird, sind die beiden Graphen nahezu identisch.

7.4 Diskussion

Die Ergebnisse der Rechnungen mit Ortsauflösung zeigen, daß von den untersuchten Mechanismen thermisches Sputtering der effektivste ist. In hinreichend starken Schockwellen heizt sich das komprimierte Gas genug auf, um den gesamten in ihm enthaltenen Staub abzutragen. Für Partikel aus Eis ist dies schon bei relativ niedrigen Stoßgeschwindigkeiten der Fall. In den Staub-Mantel-Modellen werden Staubpartikel als Kerne aus Silikat oder Graphit betrachtet, die von einer Eisschicht umgeben sind. So aufgebaute Teilchen würden auch durch schwache Stoßfronten ihren Eismantel verlieren. Um die Kerne zu zerstören sind dagegen wesentlich größere Stoßgeschwindigkeiten notwendig. Dabei ist zu beachten, daß das verwendete Modell Staubpartikel als makroskopische Festkörper beschreibt. Je kleiner ein Staubteilchen ist, desto wichtiger werden seine mikroskopischen Eigenschaften. Das Verhalten sehr kleiner Partikel wird daher nur unzureichend nachgebildet. Aus diesem Grund muß die Aussage über die komplette Zerstörung der Staubteilchen relativiert werden. Aus den Ergebnissen kann nicht abgeleitet werden, ob die Partikel wirklich vollständig vaporisiert werden oder ob noch Reste übrigbleiben, die nicht mehr weiter abgetragen werden können. Die Aussagen über die Menge des abgetragenen Materials sind davon nicht betroffen.

Nicht-thermisches Sputtering kann nur in einem schmalen Bereich kurz hinter der Stoßfront auftreten, solange die Staubpartikel noch nicht die Geschwindigkeit des sie umgebenden Mediums angenommen haben. Dieser Bereich und die dabei auftretenden mittleren Relativgeschwindigkeiten sind aber so klein, daß dieser Effekt keine nennenswerte Rolle spielt.

Obwohl die Zeitskala für Streuprozesse sehr klein ist, sind diese im Rahmen ortsaufgelöster Rechnungen nicht vernachlässigbar. Verantwortlich dafür sind räumliche Effekte. Direkt hinter der Stoßfront werden die leichten Staubteilchen schnell abgebremst. Dadurch bildet sich hier ein Gebiet mit einem hohen Anteil an leichten Partikeln. Schwere Teilchen reagieren dagegen träger. Sie durchdringen dieses Gebiet, ohne dabei stark abgebremst zu werden. Bei kleinen Schockgeschwindigkeiten dominiert die Vaporisation von Staubmaterial durch Partikelstöße. Sie führt dabei nur zu einer partiellen Zerstörung von Staub. Daneben werden Staubpartikel in kleinere Teilchen zerschlagen, was aber nur zu einem leichten Anstieg der Teilchendichte führt. Der damit verbundene Zuwachs an Stauboberfläche begünstigt die Molekülbildung und die Kühlung. Der Effekt ist aber so gering, daß er von den Zerstörungsprozessen überdeckt wird.

Das Modell führt zu ähnlichen Ergebnissen wie die Arbeit von Jones et al. (1994).^[22] Die einzelnen Zerstörungsmechanismen zeigen qualitativ und der Größenordnung nach das gleiche Verhalten. Wie in den Abbildungen 7.4 (c), (d) und (e) zu sehen ist, zeigen die Masseverluste durch nicht-thermisches Sputtering und Vaporisation bei allen untersuchten Materialien unterhalb von $v_s = 200 \text{ km s}^{-1}$ ein Maximum. Bei Geschwindigkeiten oberhalb von 150 km s^{-1} dominiert Sputtering durch thermische Ionen und führt zu einem stetigen Anstieg. Der Beitrag von nicht-thermischem Sputtering zur Abtragung von Oberflächenmaterial ist bei Jones et al. (1994)^[22] jedoch wesentlich größer. Ursache hierfür ist die Berücksichtigung von Magnetfeldern. Dabei werden geladene Staubpartikel durch veränderliche B -Felder beschleunigt und können die Bewegung relativ zum umgebenden Medium länger aufrechterhalten. Wegen der Berücksichtigung verschiedener physikalischer Prozesse sind die Ergebnisse beider Modelle nur bedingt vergleichbar.

Ausgangspunkt für die Staubzerstörungsrechnungen war ein Hydrodynamikmodell zur Berechnung von protostellaren Jetströmungen. Ziel war dabei die Behandlung des Staubes, der als Kühlmittel und als Katalysator zur Bildung von Wasserstoffmolekülen dient, zu verbessern. In dem Modell wurde ein festes Verhältnis von Gas- und Staubmasse angenommen. Die Unterschiede, die sich durch die detailliertere Behandlung der Staubprozesse ergeben, werden an dieser Stelle erläutert.

In Abbildung 7.7 sind zum Vergleich die Profile der Gasdichten, die mit den beiden Modellen berech-

net wurden, für verschiedene Stoßgeschwindigkeiten geplottet. Bei $v_s = 250 \text{ km s}^{-1}$ sind die Unterschiede beider Rechnungen gering. Wegen des Energieverlustes durch atomare Linienstrahlung kühlt sich das Gas ab und verdichtet sich, bis die Verhältnisse die Bildung von Wasserstoffmolekülen ermöglichen. Die Kühlung durch gemischte Rotations- und Vibrationsübergänge kann nun das Gas schnell weiter verdichten. Da atomare Linienstrahlung nur in heißem Gas effektiv ist, kann sie das Medium nicht auf niedrige Temperaturen bringen. Staub kann das System nur langsam abkühlen. Die Grenze ist erreicht, wenn die Gastemperatur unter die der Staubpartikel fällt. Nun wird das Medium durch den Staub erwärmt und es bildet sich ein Gleichgewicht zwischen der Staubheizung und der Kühlung durch die Moleküle. Da in diesem Beispiel genug Staub vorhanden ist, ist der Heizmechanismus so effektiv, daß die Gleichgewichtstemperatur sehr nahe bei der Staubtemperatur liegt. In beiden Modellen wird dem Staub eine konstante Temperatur von 10 K zugeordnet. Die Verringerung des Staubanteils durch die destruktiven Prozesse sorgt dafür, daß sich die Bildung von Wasserstoffmolekülen auf den Oberflächen der Staubpartikel verlangsamt. Das Erreichen des Gleichgewichtszustands wird dadurch verzögert.

Wird bei höheren Schockgeschwindigkeiten mehr Staubmaterie abgetragen, können sich zum Abklingen der atomaren Kühlung noch nicht genug Wasserstoffmoleküle bilden, um die weitere Senkung der Gastemperatur zu forcieren. Das Gas kühlt sich nun nur noch durch den Einfluß des Staubes ab, was aber wesentlich langsamer vonstatten geht. Wenn die Temperatur niedrig genug ist, setzt die Reassoziaton von Molekülen ein und die Abkühlung wird beschleunigt. In Abbildung 7.7 (b), die das Ergebnis für einen Schock mit der Geschwindigkeit $v_s = 350 \text{ km s}^{-1}$ zeigt, ist diese Verzögerung erkennbar. Je mehr Staub zerstört wird, um so ausgeprägter fällt diese Verzögerung aus. Die Abbildungen 7.7 (b) und (c) veranschaulichen dieses Verhalten. Ist die abgetragene Staubmasse groß, ist die Wirkung des Staubes auf das Medium im Vergleich zur Kühlung durch Moleküle klein. Dadurch kann im Gleichgewichtsfall die Temperatur deutlich unter die Staubtemperatur fallen und sich noch mehr verdichten. Dies zeigt sich in Abbildung 7.7 (d). Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die Zerstörung von Staub zu einer Verringerung der Staubkühlung führt. Daraus resultiert, daß das Gas wesentlich mehr Zeit benötigt, um auf extrem niedrige Temperaturen abgekühlt zu werden, als wenn genug Staub vorhanden ist.

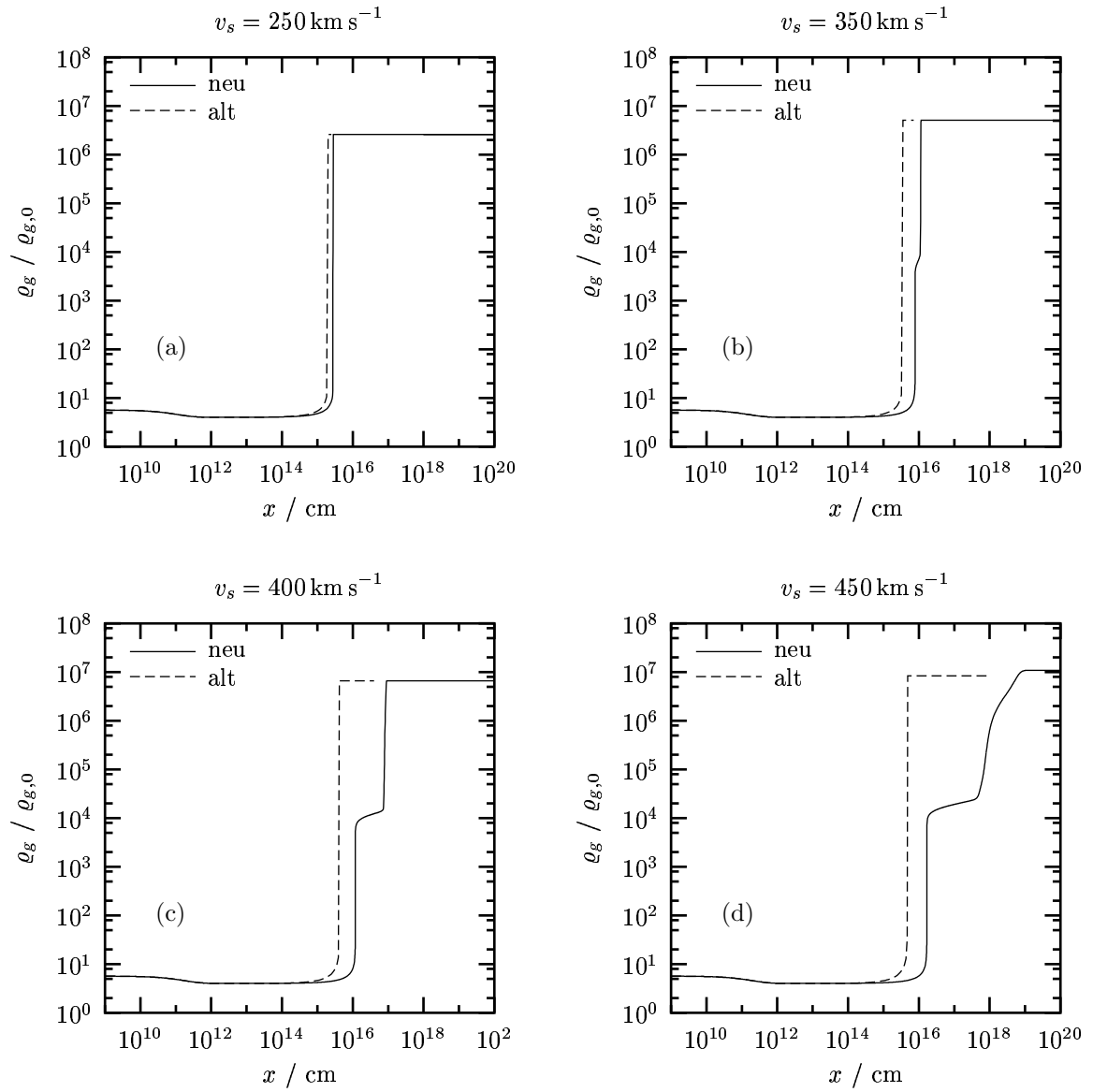


Abbildung 7.7: (a)–(d) Vergleich des Modells mit detaillierter Staubdynamik mit dem ursprünglichen Modell, bei dem ein festes Verhältnis von Gas- zu Staubmasse angenommen wird. Die Plots stellen Gasdichten als Funktion der Entfernung zur Stoßfront für verschiedene Stoßgeschwindigkeiten dar.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Modell entwickelt, das die dynamischen Prozesse, denen interstellaren Staubpartikel bei der Durchquerung von Stoßfronten unterworfen sind, beschreibt. Im Gegensatz zu bisherigen Modellen werden die Staubteilchen dabei nicht allein durch ihre Masse, sondern auch durch ihre Geschwindigkeit charakterisiert. Sie werden darin als homogene, sphärische Teilchen betrachtet. Die Kopplung an das umgebende Gas und die destruktiven Prozesse, denen Staubpartikel im heißen Nachstoßgebiet interstellarer Schockwellen ausgesetzt sind, wurden quantitativ beschrieben. Detailliert untersucht wurden insbesondere die Prozesse Fragmentation und Vaporisation durch Partikelkollisionen sowie Sputtering durch thermische und nicht-thermische Ionen. Es wurden Gleichungen eingeführt, die die Änderung einer Staubverteilung durch diese Vorgänge angeben. Diese wurden in einem zeitabhängigen numerischen Modells *ohne* Ortsauflösung implementiert, welches die obigen Gleichungen für eine Staubverteilung $D(m, v)$, die von Partikelmasse und -geschwindigkeit abhängig ist, umsetzt. Mit Hilfe dieses Modells wurden die Zeitskalen der verschiedenen Prozesse untersucht. Dabei wurden verschiedene Staubmaterialien in Betracht gezogen, wie sie in der Natur beobachtet werden können. Die Größenverteilung der Staubpartikel wurde durch ein Potenzgesetz beschrieben, welches an die Ergebnisse von Beobachtungen von interstellarem Staub angepaßt ist (MRN-Verteilung).

Darauf aufbauend wurde das numerische Modell im nächsten Schritt erweitert, um damit ortsauflöste Probleme zu berechnen. Dazu wurden stationäre Lösungen für eine eindimensionale Stoßwelle in kartesischer Geometrie numerisch berechnet. Die Gleichungen der Staub- als auch der Hydrodynamik wurden simultan gelöst, wobei die Wechselwirkungen zwischen Gas und Staub berücksichtigt sind. Damit war es möglich, die Staubzerstörungsprozesse beim Durchqueren einer Stoßfront zu studieren. Für die Berechnung der hydrodynamischen Prozesse diente ein Code als Grundlage, der von Suttner et al. (1996)^[47] zur Modellierung protostellarer Jets entwickelt wurde. Das Gas wird darin als Gemisch aus molekularem und atomarem Wasserstoff mit einer konstanten Beimengung an Helium betrachtet, wobei sich das Verhältnis von Wasserstoffmolekülen und -atomen durch Reassoziaton und Dissoziation ändern kann. Der Staub dient bei der Molekülbildung als Katalysator und trägt neben anderen Mechanismen zur Kühlung des Mediums bei. Die Physik in diesem Zusammenhang wurde erläutert. Im Gegensatz zum ursprünglichen Hydrodynamikmodell von Suttner et al. (1996)^[47] ist der Staubanteil nicht mehr durch einen konstanten Faktor an die Gasdichte gekoppelt, sondern ändert sich durch dynamische Prozesse und beeinflusst auf diese Weise die Hydrodynamik.

Es wurden Rechnungen für verschiedene Schockgeschwindigkeiten durchgeführt. Dabei erwies sich die Abtragung von Oberflächenmaterial durch die Einwirkung thermischer Ionen, das thermische Sputtering, als effektivster Staubzerstörungsmechanismus bei Schockgeschwindigkeiten größer als 100 km s^{-1} . Dagegen war nicht-thermisches Sputtering ohne große Bedeutung. Es kann nur auftreten, wenn sich Staubpartikel relativ zum umgebenden ionisierten Gas bewegen. Wegen der guten Kopplung des Staubes an das heiße, komprimierte Gas hinter der Stoßfront wird dieser schnell abgebremst. Da das zugrunde gelegte hydrodynamische Modell keine Magnetfelder behandelt, fehlt als zusätzlicher Beschleunigungsmechanismus für Staubteilchen die Betatronbeschleunigung. Aus diesem Grund kann die Relativgeschwindigkeit nicht lange genug aufrechterhalten werden, um eine nennenswerte Abtragung von Material zu erhalten. Somit sind die Ergebnisse nur eingeschränkt mit den Veröffentlichungen von Jones et al. (1994, 1996)^[22, 23] vergleichbar. Bei niedrigeren Schockgeschwindigkeiten, $v_s = 100 \text{ km s}^{-1}$, ist die Vaporisation von Staubmaterial durch Partikelkollisionen der dominierende Staubzerstörungsprozeß. Bei diesen Ereignissen werden die Staubteilchen zusätzlich in kleinere Fragmente zerschlagen. Durch diesen Vorgang, dem Shattering, wird die zur Verfügung stehende Stauboberfläche vergrößert. Dies führt zu einer stärkeren Molekülbildung und erhöht den kühlenden Einfluß des Staubes auf das umgebende Gas. Der Effekt, der durch die Fragmentation bewirkt wird, ist allerdings so klein, daß er durch die Abtragung von Staubmaterial durch die anderen Effekte überdeckt wird. Die Rückwirkung auf das Gas ist am stärksten bei starken Schocks, in denen viel Staubmaterial abgetragen wird. Dadurch können sich im Nachstoßgebiet nur langsam Moleküle bilden. Die verringerte Staub- und Moleküldichte bedingt eine Verringerung der Kühlung des Gases und führt zu einer verzögerten Verdichtung.

Dies ist das erste Staubmodell, welches die Geschwindigkeit der Staubteilchen in der Staubverteilung berücksichtigt. Auf diese Weise können Partikelströme beschrieben werden, die sich gegenseitig durchdringen. Es ist daher grundsätzlich möglich, komplexere Strömungen zeitabhängig und auch in mehr Raumdimensionen zu modellieren. Das Modell bildet somit die Grundlage für eine weitergehende Forschungstätigkeit. Im Rahmen dieser Weiterführung sollte zuerst die eingeschlossene Physik verbessert werden. Zunächst steht eine detailliertere Behandlung der Ionisation des Gases an. Auch sollten Magnetfelder in das Modell integriert werden, um so die Ergebnisse besser vergleichbar mit früheren Arbeiten zu machen. Dabei muß neben deren Einfluß auf die Hydrodynamik auch die Wirkung, die sie auf den Staub haben, berücksichtigt werden. Dies sollte in Zukunft angegangen werden.

Anhang

A Abschätzungen zur Ionisation des interstellaren Gases

Im Nicht-Gleichgewichtsfall verändert sich der Ionisationsgrad eines Mediums fortwährend durch Ionisation und Rekombination. Für die Abschätzung der Geschwindigkeit, mit der diese Prozesse ablaufen, wird nur die Ionisation, die aus Stößen mit thermischen Elektronen resultiert, einbezogen. Um die Ionisation in Gang zu bringen, ist eine geringe Anzahl freier Elektronen notwendig. Obwohl zu ihrer Erzeugung andere Ionisationsmechanismen nötig sind, werden diese hier vernachlässigt.

Die berücksichtigten Prozesse sind temperaturabhängig und werden durch Ratenkoeffizienten beschrieben, die im folgenden mit $\alpha_I(T)$ und $\alpha_R(T)$ bezeichnet werden. Handelt es sich um reines Wasserstoffgas, wird die Zeitabhängigkeit der Dichte der H^+ -Ionen durch die folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$\dot{n}(\text{H}^+) = \alpha_I(T) n_e n(\text{H}) - \alpha_R(T) n_e n(\text{H}^+) . \quad (\text{A.1})$$

Die Gesamtzahl der Atomrümpfe n_p bleibt dabei erhalten.

$$n_p = n(\text{H}) + n(\text{H}^+) . \quad (\text{A.2})$$

Da die Zahl der freien Elektronen immer gleich der Zahl der positiven Ionen ist,

$$n_e = n(\text{H}^+) , \quad (\text{A.3})$$

vereinfacht sich Gleichung (A.1) zu

$$\dot{n}(\text{H}^+) = A(T) n(\text{H}^+) - B(T) n^2(\text{H}^+) . \quad (\text{A.4})$$

Dabei sind die Konstanten durch

$$A(T) = \alpha_I(T) n_p , \quad (\text{A.5})$$

$$B(T) = \alpha_I(T) + \alpha_R(T) \quad (\text{A.6})$$

gegeben.

Gleichung (A.4) hat

$$n(\text{H}^+) = \frac{A(T)}{B(T) + C(T) e^{-A(T)t}} \quad (\text{A.7})$$

als Lösung. Die Integrationskonstante

$$C(T) = \frac{A(T)}{n_0(\text{H}^+)} - B(T) \quad (\text{A.8})$$

wird durch die Anfangsdichte $n_0(\text{H}^+)$ der Wasserstoffionen bestimmt, die beispielsweise durch Photoionisation verursacht wird. Die Wasserstoffionendichte, die sich im Gleichgewichtsfall einstellt, ergibt sich durch den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow \infty$ aus Gleichung (A.7).

$$n(\text{H}^+) = \frac{\alpha_I(T) n_p}{\alpha_I(T) + \alpha_R(T)} . \quad (\text{A.9})$$

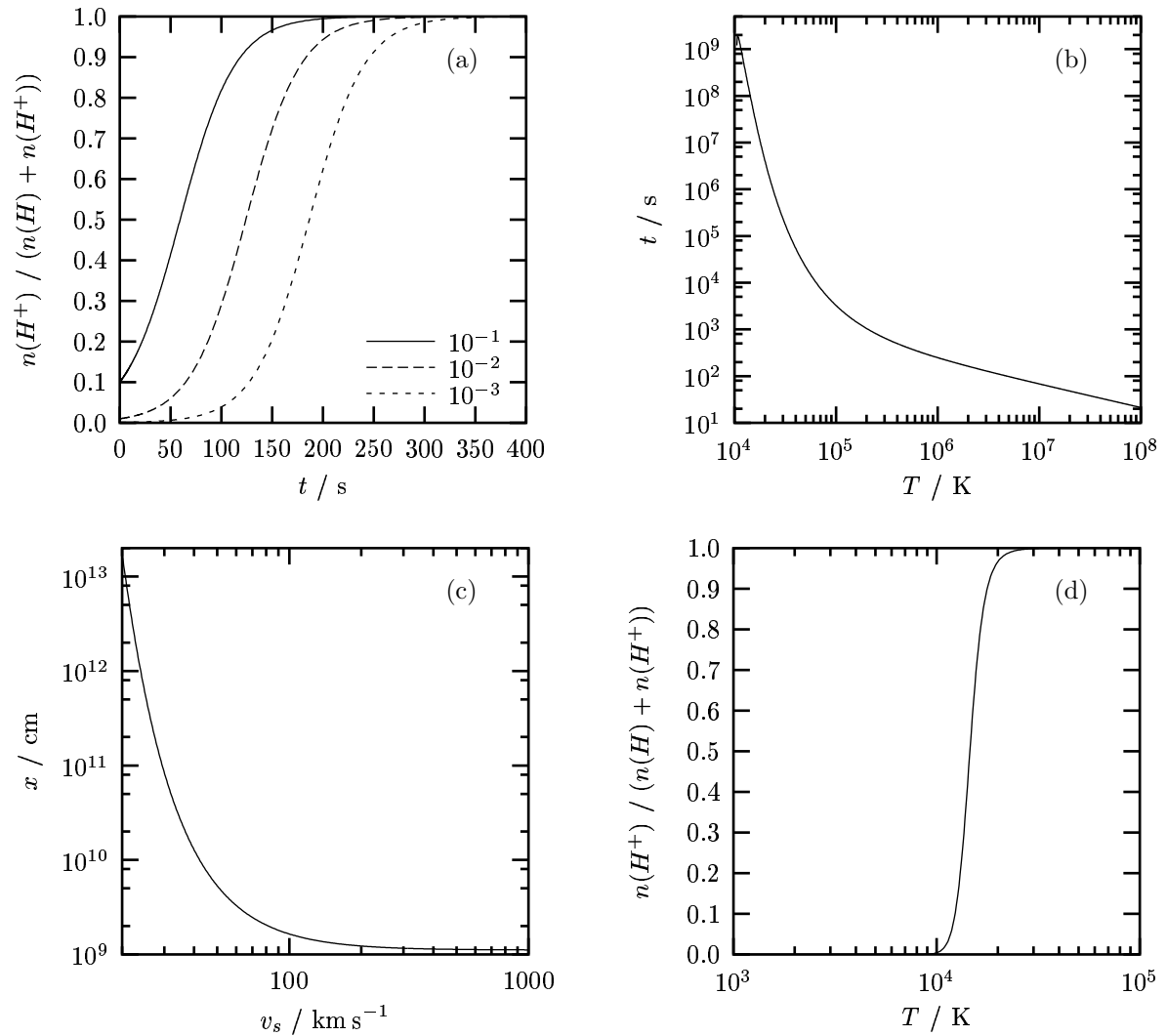


Abbildung A.1: (a) Die Dichte der H^+ -Ionen in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Anfangsionisationen. Das Gas hat eine Temperatur von $T = 10^6$ K und eine Dichte von $n_p = 5.6 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. (b) Die Zeit bis die Zahl der H^+ -Ionen einen Anteil von 99% überschreitet für eine Anfangsionisation von $n(H^+)/n_p = 10^{-2}$. Die Dichte beträgt $n_p = 5.6 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. (c) Der Abstand von der Stoßfront, bei dem das Gas einen H^+ -Ionenanteil von 99% erreicht, in Abhängigkeit von der Schockgeschwindigkeit v_s . Das Gas besitzt vor dem Stoß eine Temperatur von $T = 100$ K, eine Dichte von $n_p = 2.8 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ und eine Ionisation von $n(H^+)/n_p = 10^{-2}$. (d) Der Anteil der H^+ -Ionen im Gleichgewichtsfall in Abhängigkeit von Temperatur.

Um die Größenordnung der zeitlichen Änderung der H^+ -Ionen richtig abzuschätzen, müssen die Koeffizienten $\alpha_I(T)$ und $\alpha_R(T)$ geeignet gewählt werden. Für den Ionisationskoeffizienten wird eine semiempirische Formel für die Ionisation wasserstoffähnlicher Atome aus dem i -ten Energieniveau durch thermische Elektronen nach Jeffries (1968)^[21] verwendet.

$$\alpha_I(T) \approx 7.8 \times 10^{-11} T^{1/2} i^3 \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (\text{A.10})$$

E_i ist das dazugehörige Ionisationspotential. Es wird angenommen, daß sich die Atome im Grundzustand befinden ($i = 1$). Da andere Mechanismen unberücksichtigt bleiben, kann die Ionisation schneller ablaufen.

Die Abnahme der H^+ -Ionen wird durch einen Koeffizienten nach Kaplan und Pikelner (1970)^[26] abgeschätzt, der die Rekombination in angeregte Zustände von Wasserstoff beschreibt.

$$\alpha_R(T) \approx 2.6 \times 10^{-13} \left(\frac{10^4}{T}\right)^{0.85} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}. \quad (\text{A.11})$$

Die Abbildung A.1(a) zeigt die Lösung (A.7), die sich bei der Verwendung der Ratenkoeffizienten (A.10) und (A.11) für verschiedenen Ausgangsionisationen ergeben. Obwohl die Ionisation zu Beginn um mehrere Zehnerpotenzen variiert, wird das Gleichgewicht jeweils nach einer Zeitspanne der Größenordnung von 100 s erreicht. Die Kurven verdeutlichen, daß die Zeitskala der Ionisation nicht sehr stark von der Anfangsdichte der H^+ -Ionen abhängt. Die Temperaturabhängigkeit der Zeitskala wird durch Abbildung A.1(b) beschrieben. Die Kurve zeigt die Dauer, bis sich die Wasserstoffionendichte nur noch um ein Prozent vom Gleichgewichtswert unterscheidet. Für sehr heißes Gas ist diese Zeitspanne verhältnismäßig kurz, steigt aber mit sinkender Temperatur stark an. Für Abbildung A.1(c) wurden Gastemperatur und -dichte in einer Stoßwelle mit der Schockgeschwindigkeit v_s berechnet. Die Zeitdauer, die sich daraus ergibt, wurde mit Hilfe der Gasgeschwindigkeit in eine Länge umgerechnet. Demnach stellt sich das Gleichgewicht bei starken Stößen sehr schnell ein. Erst bei Geschwindigkeiten unterhalb von etwa 50 km s^{-1} wird diese Länge sehr groß.

B Modellbeispiele: Kratermasse

Beispiel 1:

$$f(x) = \frac{1}{1 + Ax^3} \quad (\text{B.1})$$

$$f^{-1}(x) = \sqrt[3]{\frac{1}{A} \left(\frac{1}{x} - 1\right)} \quad (\text{B.2})$$

$$\xi = \frac{1}{3A} \ln(1 + A) \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\langle \Delta M \rangle}{M} = \frac{1}{A} \frac{1}{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_k} - 1} \left(\frac{1}{12} + \frac{\epsilon_0^4}{4\epsilon_k^4} - \frac{\epsilon_0^3}{3\epsilon_k^3} \right) \quad (\text{B.4})$$

Beispiel 2:

$$f(x) = e^{-Ax} \quad (\text{B.5})$$

$$f^{-1}(x) = \frac{1}{A} \ln \frac{1}{x} \quad (\text{B.6})$$

$$\xi = \frac{1}{A^3} [2 - e^{-A} (A^2 + 2A + 2)] \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\langle \Delta M \rangle}{M} = \frac{1}{A^3} \frac{1}{1 - \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0}} \left[6 \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} - 9 \left(\ln \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \right)^3 - 3 \left(\ln \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} \right)^2 - 6 \ln \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} - 6 \right] \quad (\text{B.8})$$

Beispiel 3:

$$f(x) = 1 - Ax \quad (\text{B.9})$$

$$f^{-1}(x) = \frac{1}{A}(1 - x) \quad (\text{B.10})$$

$$\xi = \frac{1}{3} - A\frac{1}{4} \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\langle \Delta M \rangle}{M} = \frac{1}{A^3} \frac{1}{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_k} - 1} \left(\frac{3}{2} + \frac{\epsilon_0}{\epsilon_k} + 3 \ln \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} - 3 \frac{\epsilon_k}{\epsilon_0} - \frac{\epsilon_k^2}{2\epsilon_0^2} \right) \quad (\text{B.12})$$

C Berechnung der 1D-Transportterme

Gebiet I:

$$\begin{aligned} 0 &= N_{i,j,k} \frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + N_{i,j,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + N_{i,j,k} \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \\ &\quad - N_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - N_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} - N_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} \\ &\quad + \dot{N}_{i,j,k} \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

$$\begin{aligned} 0 &= n_{i,j,k} A \Delta x_k \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \right) \\ &\quad - A \Delta x_k \left(n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} \quad (\text{C.3})$$

Gebiet II:

$$\begin{aligned} 0 &= N_{i,j,k} \frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + N_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + N_{i,j,k} \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \\ &\quad - N_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - N_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} - N_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} \\ &\quad + \dot{N}_{i,j,k} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

$$\begin{aligned} 0 &= n_{i,j,k} A \Delta x_k \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \right) + n_{i,j-1,k} A \Delta x_k \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} \\ &\quad - A \Delta x_k \left(n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k} \right) \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + n_{i,j+1,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_{j+1}} - n_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} \quad (\text{C.6})$$

Gebiet III:

$$\begin{aligned}
0 &= N_{i,j,k} \frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} - N_{i,j,k} \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_j} + N_{i,j,k} \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \\
&\quad - N_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} + N_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} - N_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_{k+1}} \\
&\quad + \dot{N}_{i,j,k}
\end{aligned} \tag{C.7}$$

$$\begin{aligned}
0 &= n_{i,j,k} A \Delta x_k \left(\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} - \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k} \right) \\
&\quad - A \Delta x_k \left(n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - n_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k} \right)
\end{aligned} \tag{C.8}$$

$$n_{i,j,k} = \frac{n_{i+1,j,k} \frac{\dot{m}_{i+1/2,j,k}}{\Delta m_{i+1}} - n_{i,j-1,k} \frac{\dot{v}_{i,j-1/2,k}}{\Delta v_{j-1}} + n_{i,j,k+1} \frac{\dot{x}_{i,j,k+1/2}}{\Delta x_k} - \dot{n}_{i,j,k}}{\frac{\dot{m}_{i-1/2,j,k}}{\Delta m_i} - \frac{\dot{v}_{i,j+1/2,k}}{\Delta v_j} + \frac{\dot{x}_{i,j,k-1/2}}{\Delta x_k}} \tag{C.9}$$

D Gleichungssystem

Smoluchowski-Gleichung:

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{\partial(D \dot{m})}{\partial m} + \frac{\partial(D \dot{v})}{\partial v} + \frac{\partial(D \dot{x})}{\partial x} = \sum_i \left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_i . \tag{D.1}$$

Beschleunigung und Massenverlustrate:

$$\dot{v} = \frac{4\pi}{3} \varrho_g \frac{a^2}{m} \sqrt{c_s^2 + (v - v_g)^2} |v - v_g| + \frac{2\pi Z^2 z^2 e^4 n}{M k_B T} G\left(\frac{v}{\hat{v}}\right) \ln \Lambda , \tag{D.2}$$

$$\dot{m} = -n_I \pi a^2 \langle |v - v_g| Y(|v - v_g|) \rangle \bar{m}_d - n_I \pi a^2 |v - v_g| Y(|v - v_g|) \bar{m}_d . \tag{D.3}$$

Massenbilanz und Impulserhaltung bei Streuung:

$$m' + m'' = m + \Delta m = m + \Delta m_{sh} + \Delta m_{vap} , \tag{D.4}$$

$$m' v' + m'' v'' = (m' + m'') v . \tag{D.5}$$

Streuterme:

$$\left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_{cr+} = \frac{1}{2} \iiint \alpha \delta^{(m)} \delta^{(v)} D(m', v') D(m'', v'') dm' dm'' dv' dv'' , \tag{D.6}$$

$$\left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_{cr-} = -D \iint \alpha D(m', v') dm' dv' , \tag{D.7}$$

$$\left[\frac{\partial D}{\partial t} \right]_{sh+} = \frac{1}{2} \iiint \alpha \beta \delta^{(v)} D(m', v') D(m'', v'') dm' dm'' dv' dv'' . \tag{D.8}$$

$$\alpha = \sigma(m', m'', |v' - v''|) |v' - v''| , \tag{D.9}$$

$$\delta^{(m)} = \delta(m + \Delta m(m', m'', |v' - v''|) - m' - m'') , \tag{D.10}$$

$$\delta^{(v)} = \delta\left(v - \frac{m' v' + m'' v''}{m' + m''}\right) , \tag{D.11}$$

$$\beta = \frac{\Delta m_{sh}(m', m'', |v' - v''|)}{m} \phi(m', m'', m, |v' - v''|) . \tag{D.12}$$

Hydrodynamische Gleichungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varrho_g + \frac{\partial}{\partial x} (\varrho_g v_g) = 0, \quad (\text{D.13})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varrho_g v_g) + \frac{\partial}{\partial x} (\varrho_g v_g^2 + p) = 0, \quad (\text{D.14})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \varrho_g v_g^2 + e \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{2} \varrho_g v_g^3 + e v_g + p v_g \right) = -\Lambda(\varrho_g, f_{\text{H}_2}, T). \quad (\text{D.15})$$

Kühlungsterm:

$$\Lambda(T, \varrho_g, f_{\text{H}_2}) = \Lambda_{\text{Atom}} + \Lambda_D + \Lambda_{\text{H}_2} + \Lambda_d. \quad (\text{D.16})$$

Chemische Reaktionen:

$$\frac{\partial(f_{\text{H}_2} \varrho_g)}{\partial t} + \frac{\partial(f_{\text{H}_2} \varrho_g v_g)}{\partial x} = 1.4 \text{ m}_\text{H} (R(T, \varrho_g, f_{\text{H}_2}) - D(T, \varrho_g, f_{\text{H}_2})). \quad (\text{D.17})$$

$$\varrho_g = 1.4 \text{ m}_\text{H} n_p, \quad (\text{D.18})$$

$$n(\text{H}) = f_{\text{H}_2} n_p, \quad (\text{D.19})$$

$$n(\text{H}_2) = (1 - 2f_{\text{H}_2}) n_p, \quad (\text{D.20})$$

$$n(\text{He}) = 0.1 n_p. \quad (\text{D.21})$$

Zustands- und Materialgleichungen:

$$e = \varrho_g c_V T, \quad (\text{D.22})$$

$$p = \frac{\varrho_g \mathcal{R} T}{\mu}, \quad (\text{D.23})$$

$$c_V = \mathcal{R} \frac{3.3 - f_{\text{H}_2}}{2.8}, \quad (\text{D.24})$$

$$\mu = \frac{1.4}{1.1 - f_{\text{H}_2}}. \quad (\text{D.25})$$

Literaturverzeichnis

- [1] Barlow, M. J., *The destruction and growth of dust grains in interstellar space. I – Destruction by sputtering. II – Destruction by grain surface reactions, grain-grain collisions and photodesorption. III – Surface recombination, heavy element depletion and mantle growth*, 1978, MNRAS, 183, 367
- [2] Black, J. H., *Molecules in planetary nebulae*, 1978, ApJ, 222, 125
- [3] Bohdansky, J., Roth, J., Bay, H. L., *An analytical formula and important parameter for low-energy ion sputtering*, 1980, J. Appl. Phys., 51 (5), 2861
- [4] Bohdansky, J., *A universal relation for the sputtering yield of monoatomic solids at normal ion incidence*, 1984, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., B, 2, 587
- [5] Cohen, R. S., Spitzer, L., Routly P. M., *The electrical conductivity of an ionized gas*, 1950, Phys. Rev., 80, 230
- [6] Cox, D. P., Tucker, W. H. *Ionization equilibrium and radiative cooling of a low-density plasma*, 1969, ApJ, 157, 1157
- [7] Daniels, A., Hughes, W., *The mass distribution of an accreting system of dust particles – A Monte Carlo simulation*, 1981, MNRAS, 195, 205
- [8] Dominik, C., Gail, H.-P., Sedlmayr, E., *The size distribution of dust particles in a dust-driven wind*, 1989, A&A, 223, 227
- [9] Dominik, C., Sedlmayr, E., Gail, H.-P., *Dust formation in stellar winds. VI. Moment equations for the formation of heterogeneous and core mantle grains*, 1993, A&A, 277, 578
- [10] Dorschner, J., *Interstellar grain size spectrum and circumstellar grain-grain collisions*, 1982, Ap&SS, 81, 323
- [11] Epstein, P., 1923, *On the resistance experienced by spheres in their motion through gases*, Phys. Rev., 22, 710
- [12] Flugge, S., *Astronomy II: Stellar structure*, Encyclopedia of Physics, Vol. 51, 1958, Springer Verlag, Berlin
- [13] Fulle, M., *A dust-tail model based on Maxwellian velocity distribution*, 1992, A&A, 265, 817
- [14] Gail, H.-P., Sedlmayr, E., *Formation of crystalline and amorphous carbon grains*, 1984, A&A, 132, 163
- [15] Gail, H.-P., Sedlmayr, E., *Dust formation in stellar winds. IV – Heteromolecular carbon grain formation and growth*, 1988, A&A, 206, 153
- [16] Gauger, A., Gail, H.-P., Sedlmayr, E., *Dust formation, growth and evaporation in a cool pulsating circumstellar shell*, 1990, A&A, 235, 345
- [17] Gehrz, R., *Types of dust grains in stellar outflows*, 1989, in *Interstellar Dust*, ed. L. J. Allamandola, A. G. G. M. Tielens, (Dordrecht: Kluwer), 445
- [18] Großkinsky, S., Klingenberg, C., Oelschläger, K., *A rigorous derivation of Smoluchowski's equation in the moderate limit*, Stochastic Analysis and Application, 2003, akzeptiert
- [19] Hayakawa, H., Hayakawa S., *Power-law size distribution of dust grains*, 1988, PASJ, 40, 341
- [20] Hollenbach, D. J., McKee, C. F., *Molecule formation and infrared emission in fast interstellar shocks. I. Physical processes*, 1979, ApJSS, 41, 555

- [21] Jeffries, J. T., *Spectral line formation*, 1968, Waltham, Mass.: Blaisdell
- [22] Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., McKee, C. F., *Grain destruction in shocks in the interstellar medium*, 1994, ApJ, 433, 797
- [23] Jones, A. P., Tielens, A. G. G. M., Hollenbach, D. J., *Grain shattering in shocks: The interstellar grain size distribution*, 1996, ApJ, 469, 740
- [24] Kafatos, M., *Time-dependent radiative cooling of a hot low-density cosmic gas*, 1973, ApJ, 182, 433
- [25] Kahn, F. D., *Cocoons around early-type stars*, 1974, A&A, 37, 149
- [26] Kaplan, S. A., Pikelner, M. J., *The interstellar medium*, 1970, Cambridge, Mass.: Harvard University
- [27] Kessel'man, V. S., Frolov, A. B., *The grain size spectrum in a protostellar cloud*, 1986, Sov. Astron., 30, 284
- [28] Krüger, D., Woitke, P., Sedlmayr, E., *A general multi-component method for the description of dust grain processing*, 1995, A&ASS, 113, 593
- [29] Lepp, S., Shull, J. M., *The kinetic theory of H₂ dissociation*, 1983, ApJ, 270, 578
- [30] Mathis, J. S., Ruml, W., Nordsieck, K. H., *The size distribution of interstellar grains*, 1977, ApJ, 217, 425
- [31] Matsunami, N., Yamamura, Y., Itikawa, Y., Itoh, N., Kazumata, Y., Miyagawa, S., Morita, K., Shimizu, R., *A semi-empirical formula for the energy dependence of the sputtering yield*, 1980, Rad. Eff. Lett., S7, 15
- [32] McKee, C. F., Hollenbach, D. J., Seab, G. C., Tielens, A. G. G. M., *The structure of time dependent interstellar shocks and grain destruction in the interstellar medium*, 1987, ApJ, 318, 674
- [33] Mizuno, H., Markiewicz, W. J., Völk, H. J., *Grain growth in turbulent protoplanetary accretion disks*, 1988, A&A, 195, 183
- [34] Nakagawa, Y., Nakagawa, K., Hayashi, C., *Growth and sedimentation of dust grains in the primordial solar nebula*, 1981, Icarus, 45, 517
- [35] Rossi, S. C. F., Benevides-Soares, P., Barbuy, B., *Grain coagulation in contracting protostellar clouds*, 1991, A&A, 251, 587
- [36] Shull, J. M., *Grain disruption in interstellar hydromagnetic shocks*, 1977, ApJ, 215, 805
- [37] Shull, J. M., *Disruption and sputtering of grains in intermediate-velocity interstellar clouds*, 1978, ApJ, 226, 858
- [38] Shapiro, P. R., Kang, H., *Hydrogen molecules and the radiative cooling of pregalactic shocks*, 1987, ApJ, 318, 32
- [39] Sigmund, P., *Theory of sputtering. 1. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets*, 1969, Phys. Rev., 184, 383
- [40] Shu, F. H. *The physics of Astrophysics Vol. II – Gas Dynamics*, 1992, University Science Books, Mill Valley, CA
- [41] Smith, M. D., Suttner, G., Yorke, H. W., *Numerical hydrodynamic simulations of jet-driven bipolar outflows*, 1997, A&A, 323, 223

- [42] Smith, M. D., Suttner, G., Zinnecker, H., *Intermediate teeth in pulsed jets: a motivation for high-resolution observations*, 1997, A&A, 320, 325
- [43] Smoluchowski, M. van, *Drei Vorträge über Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen*, 1916, Phys. Z., 17, 557
- [44] Sonnhalter, C., Preibisch, T., Yorke, H. W., *On the validity of grey radiation transfer in dusty envelopes*, 1995, A&A, 299, 144
- [45] Spitzer, L., *The dynamics of the interstellar medium. I. Local equilibrium*, 1941, ApJ, 93, 369
- [46] Spitzer, L., *Physical processes in the interstellar medium*, 1978, John Wiley & Sons, New York
- [47] Suttner, G., *Numerische Simulationen zu protostellaren Jets*, 1996, Diplomarbeit, Universität Würzburg
- [48] Suttner, G., Smith, M. D., Yorke, H. W., Zinnecker, H., *Multi-dimensional numerical simulations of molecular jets*, 1997, A&A, 318, 595
- [49] Suttner, G., *Staubentwicklung in protostellaren Akkretionsscheiben*, 1999, Dissertation, Universität Würzburg
- [50] Suttner, G., Yorke, H. W., Lin, D., *Dust coagulation in protostellar envelopes. I. Compact grains*, 1999, ApJ, 524, 857
- [51] Tielens, A. G. G. M., *Carbon stardust: From soot to diamonds*, 1990, in Carbon in the Galaxy, ed. J. C. Tarter, S. Chang, D. C. De Frees (NASA SP-3061), 59
- [52] Tielens, A. G. G. M., McKee, C. F., Hollenbach, D. J., *The physics of grain-grain collisions and gas-grain sputtering in interstellar shocks*, 1994, ApJ, 431, 321
- [53] Völker, R., Smith, M. D., Suttner, G., Yorke, H. W., *Numerical hydrodynamical simulations of molecular outflows driven by hammer jets*, 1999, A&A, 343, 953
- [54] Wetherill, G. W., *Comparison of analytical and physical modelling of planetesimal accumulation*, 1990, Icarus, 88, 336
- [55] Wolfire, M. J., Cassinelli, J. P., *Conditions for the formation of massive stars*, 1987, ApJ, 319, 850
- [56] Yorke, H. W., Bodenheimer, P., Laughlin, G., *The formation of protostellar disks. I. $1 M_{\odot}$* , 1993, ApJ, 411, 274
- [57] Yorke, H. W., Bodenheimer, P., Laughlin, G., *The formation of protostellar disks. II. Disks around intermediate-mass stars*, 1995, ApJ, 443, 199
- [58] Yorke, H. W., Henning, T., *Molecules in the stellar environment*, 1995, IAU Colloquium, 146, 186
- [59] Yorke, H. W., Kruegel, E., *The dynamical evolution of massive protostellar clouds*, 1977, A&A, 54, 183
- [60] Yorke, H. W., *Calculated infrared spectra of cocoon stars*, 1977, A&A, 58, 423
- [61] Yorke, H. W., *The evolution of protostellar envelopes of masses $3 M_{\odot}$ and $10 M_{\odot}$. I. Structure and hydrodynamic evolution*, 1979, A&A, 80, 308
- [62] Yorke, H. W., *The evolution of protostellar envelopes of masses $3 M_{\odot}$ and $10 M_{\odot}$. II. Radiation transfer and spectral appearance*, 1980, A&A, 85, 215

Die numerischen Simulationen dieser Arbeit wurden auf den LINUX-Workstations des Rechenzentrums und des Astronomischen Instituts der Universität Würzburg durchgeführt. Für die Auswertung der Daten sowie die Erstellung der Graphiken wurden die Programme GNUPLOT und XFIG verwendet. Der Text der Dissertation wurde mit dem Satzsystem L^AT_EX₂ ϵ gestaltet.

Danksagung

Folgenden Personen bin ich zu Dank verpflichtet:

Herrn Dr. Harold W. Yorke für die Betreuung dieser Arbeit, die zahlreichen Anregungen und Diskussionen im Zusammenhang mit der Physik interstellarer Staubpartikel und dafür, daß er mir den Aufenthalt am Caltech/JPL in Pasadena (USA) ermöglicht hat.

Herrn Prof. Dr. Christian Klingenberg für die Betreuung dieser Arbeit und die Unterstützung in den vergangenen vier Jahren. Ohne seine Hilfe wäre die Fertigstellung dieser Dissertation nicht möglich gewesen.

Herrn Prof. Dr. Friedrich Schmitz für viele hilfreiche Diskussionen.

Herrn Dr. Gerhard Suttner für zahlreiche Ratschläge und Anregungen.

Frau Dr. Sabine Richling, Herrn Dr. Stefan Kirchner, Herrn Dr. Alexander Keller, Frau Dr. Ulrike Beyer und Frau Regina Völker für die gründliche Durchsicht des Manuskripts.

Lebenslauf

Roland Völker
Breslauerstraße 12
97072 Würzburg

geboren am 11.09.1969 in Kronach, ledig

Ausbildung und berufliche Stationen:

09/1976–07/1977	Grundschule Küps
09/1977–07/1980	Grundschule Johannisthal
09/1980–07/1981	Hauptschule Küps
09/1981–06/1990	Frankenwaldgymnasium Kronach
06/1990	Abitur
07/1990–09/1991	Zivildienst im Kreiskrankenhaus Kronach
10/1991–09/1997	Studium der Physik an der Julius-Maximilians-Universität Würzburg
10/1993	Vordiplom in Physik
09/1997	Diplom in Physik
seit 10/1997	Dissertation bei Prof. Dr. H. W. Yorke an der Julius-Maximilians-Universität Würzburg
10/1997–03/2001	wissenschaftlicher Mitarbeiter an den Lehrstühlen für Astronomie und für Angewandte Mathematik der Julius-Maximilians-Universität Würzburg
seit 10/2001	Mitarbeiter am Rechenzentrum der Julius-Maximilians-Universität Würzburg

Würzburg, den 14. Dezember 2003

ENDUT HOCH HECH!