

FLORIAN OBER

LINIEN-STRAHLUNGSTRANSPORT IN ZIRKUMSTELLAREN
SCHEIBEN

**LINIEN-STRAHLUNGSTRANSPORT IN ZIRKUMSTELLAREN
SCHEIBEN**

Dissertationsschrift
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

vorgelegt
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

von
Florian Ober

Kiel, 2016

Florian Ober: *Linien-Strahlungstransport in zirkumstellaren Scheiben*, Theoretische Modelle und Vorhersagen von Beobachtungen, © 21. Januar 2016

GUTACHTER:

Prof. Dr. Sebastian Wolf

Prof. Dr. Bernd Heber

TAG DER MÜNDLICHEN PRÜFUNG: 12. April 2016

ZUM DRUCK GENEHMIGT: 12. April 2016

gez. Prof. Dr. Wolfgang J. Duschl

Gewidmet meiner Familie.

ZUSAMMENFASSUNG

Heutzutage gilt es als gesicherte Erkenntnis, dass Planeten in jungen Staub- und Gas-scheiben entstehen. Aufgrund der Interaktion des Planeten mit der zirkumstellaren Scheibe sind charakteristische Strukturen wie lokale Scheibeninhomogenitäten, massive Spiralarme und prominente Scheibenlücken vorhergesagt. Allerdings können auch andere Mechanismen, wie die Selbstgravitation oder die magnetische Wechselwirkung zu vergleichbaren Strukturen führen. Um die zugrunde liegenden, physikalischen Prozesse zur Entstehung dieser Strukturen zweifelsfrei zu identifizieren, sind daher detaillierte Simulationen der beobachteten elektromagnetischen Strahlung notwendig.

In der Vergangenheit beschränkten sich räumlich aufgelöste Beobachtungen, aufgrund der geringen Sensitivität vorhandener Instrumente, auf Kontinuum-Beobachtungen der Staubkomponente. Beobachtungen der Gaskomponente waren meist auf die gesamte Scheibe beschränkt. Daher ist über die lokale Scheibendynamik, wie z. B. über die vorhergesagte radiale und vertikale Abhängigkeit der Turbulenz, aus Beobachtungen bis heute wenig bekannt. Allerdings existiert nun mit dem ALMA-Interferometer ein neues, wegweisendes Instrument, welches potenziell in der Lage ist, diese Fragen durch räumlich aufgelöste Linienbeobachtungen im (Sub-)Millimeterwellenlängenbereich zu beantworten.

In der hier vorliegenden Arbeit wird daher das Strahlungstransportprogramm *Mol3D* entwickelt und vorgestellt. Dieses ist in der Lage, sowohl die Emission und Absorption von Moleküllinien als auch des Staubs im Kontext protoplanetarer Scheiben zu simulieren und effizient ideale räumlich und spektral aufgelöste Flusskarten zu erzeugen. Weiter wird der Funktionsumfang des Programms vorgestellt und die verwendeten, zugrunde liegenden physikalischen Gesetze und Annahmen skizziert. Im Anschluss an die Darstellung der theoretischen Umsetzung wird die korrekte Implementierung und Funktionsweise von *Mol3D* dargestellt. Dazu werden ausgewählte Vergleichssimulationen durchgeführt und die Ergebnisse mit getesteten Programmen und, soweit es möglich ist, mit analytischen Ergebnissen verglichen.

Abschließend werden zwei Studien zur Beobachtbarkeit von oben genannten Scheibenstrukturen mithilfe von räumlich aufgelösten Moleküllinien vorgestellt. Dazu werden auf Basis von HD- und MHD-Simulationen von protoplanetaren Scheiben zum einen die Beobachtbarkeit von Planeten-induzierten Scheibenlücken und zum anderen die Beobachtbarkeit von lokalen durch Turbulenzen getriebenen Strömungen diskutiert. Beiden Studien ist gemein, dass auf Grundlage der Ergebnisse der idealen Simulationen ALMA-Beobachtungen simuliert werden, die darlegen unter welchen Voraussetzungen reale Beobachtungen dieser vorhergesagten Strukturen möglich sind. Daher leistet diese Arbeit einen wichtigen Beitrag bei der Planung zukünftiger Molekülbeobachtungen mit modernen Teleskopen, wie z. B. mit ALMA.

ABSTRACT

Today it's common knowledge that planets form and develop in gas and dust disks around young pre-main-sequence stars. Due to the interaction between the planet and the disk, characteristic structures like local disk inhomogeneities, enlarged spiral arms and prominent gaps are predicted. However, similar structures are expected due to self-gravitation or the interaction of the disk with a magnetic field. Thus, to unambiguously identify the underlying physical processes which create these structures, detailed simulations of the observed electromagnetic radiation in each case are necessary.

In the past, mainly because of the lack of sensitivity of the available instruments, spatially resolved observations were mostly limited to continuum observations of the dust component. Observations of the gas component were mostly restricted to unresolved observations of the whole disk. Thus, information about the local disk dynamic derived from observations, e.g. the radial and vertical dependency of the turbulence, are to this day still very limited. However, thanks to the unparalleled power of the nascent ALMA observatory - ALMA is more than an order of magnitude more powerful (both in sensitivity and angular resolution) than its competitors - spatially and spectral resolved line observations in the (sub-)mm wavelength range will potentially allow to answer the questions outlined above.

For this reason the new radiative transfer program *Mol3D* is presented. This code simulates the emission and absorption of molecular lines as well as the dust component of complex distributed structures in the context of protoplanetary disks, allowing the creation of ideal spatially and spectral resolved flux density maps. Furthermore, in this thesis the functional range of *Mol3D* is illustrated and the underlying physical laws and assumptions are derived. To ensure the correct implementation and to demonstrate the reliability of the results, a detailed benchmark test is carried out. *Mol3D* is compared with other tested radiation transfer codes and analytic solutions if available.

On this basis, *Mol3D* is applied in two dedicated studies aiming to determine the feasibility of molecular-line observations of the aforementioned structures. Based on HD- and MHD-simulations of protoplanetary disks carried out by international partners it is shown under which circumstances it is possible to trace planet-induced gaps as well as local turbulent streams. In addition, the ideal velocity-channel maps of both studies generated with *Mol3D* are passed to the CASA package to simulate realistic ALMA observations and the findings are discussed. Thus, the results of these studies present insights for future ALMA observations which aim to resolve the origin of the aforementioned structures.

INHALTSVERZEICHNIS

1 EINLEITUNG UND EINORDNUNG	1
I GRUNDLAGEN 3	
2 ZIRKUMSTELLARE SCHEIBEN 5	
2.1 Scheibenentstehung und -entwicklung	5
2.2 Beobachtbarkeit	7
2.2.1 ALMA	8
2.3 Modellierung	10
2.3.1 Scheibenmodelle	10
2.3.2 CASA	11
2.4 Motivation der Arbeit	12
3 STRAHLUNGSTRANSPORT 13	
3.1 Grundgleichungen des Strahlungstransports	13
3.2 Die Behandlung des Gases	15
3.2.1 Molekülübergänge	16
3.2.2 Berechnung der Besetzungszahlen	17
3.3 Das verwendete Staubmodell	20
3.3.1 Gemittelte Staubkorneigenschaften	21
3.4 Monte-Carlo-Strahlungstransport	22
3.4.1 Pseudozufallszahlen	23
3.4.2 Das fundamentale Prinzip	25
3.4.3 Strahlungstransportprogramme	27
II ENTWICKLUNG EINES LINIEN-STRAHLUNGSTRANSPORTPROGRAMMS 29	
4 THEORETISCHE ABLEITUNG 31	
4.1 Vorgaben und Ziele der Entwicklung	31
4.2 Eigenschaften von Mol3D	31
4.2.1 Bestimmung des Photonenwegs	33
4.2.2 Streuung an kugelförmigen Staubkörnern und Polarisation	35
4.2.3 Heizung des Staubs	36
4.2.4 Die Behandlung des Gases	38
4.2.5 Numerische Detektion des Photons	41

5 BENCHMARKS UND TESTS	47
5.1 Einleitung	47
5.2 Temperaturberechnung des Staubs	47
5.2.1 Optisch dünner Fall	48
5.2.2 Optisch dicker Fall	49
5.3 Kontinuumsstrahlung	51
5.3.1 Vergleich der spektralen Energieverteilung	52
5.3.2 Vergleich der unterschiedlichen Berechnungsmethoden	53
5.3.3 Vergleich der räumlich aufgelösten Flusskarten	54
5.4 Liniенstrahlung	59
5.4.1 Räumlich aufgelöste Moleküllinien	59
5.4.2 Quantitativer Vergleich der Linienspektren	63
5.5 Technische Details	66
5.6 Bedeutung der Entwicklung für diese Arbeit	66
III STUDIEN	69
6 NACHWEIS VON SCHEIBENLÜCKEN MITHILFE VON MOLEKÜLLINEN	71
6.1 Einleitung und Motivation	71
6.2 Vorstellung des Modells	74
6.2.1 3D Hydrodynamik-Simulationen	74
6.2.2 Scheibenmodell	76
6.3 Ergebnisse	80
6.3.1 Ideale Linienkarten	80
6.3.2 Algorithmus zur Nachweisbarkeit von Scheibenlücken	87
6.3.3 Übersichtskarten im idealen Fall	89
6.3.4 Simulierte ALMA-Beobachtungen	92
6.4 Fazit	102
7 TURBULENTE SCHEIBEN	105
7.1 Einleitung und Motivation	105
7.2 3D Magnetohydrodynamik-Simulationen	107
7.3 Linien-Strahlungstransport	109
7.3.1 Stellare und Scheibeneigenschaften	109
7.3.2 Molekülverteilung und Besetzungsgrößen	109
7.3.3 Definition der betrachteten Modelle	110
7.4 Ergebnisse	111
7.4.1 Ableitung der Linienbreite	111
7.4.2 Beobachtbarkeit von lokalen Asymmetrien	113
7.4.3 Betrachtung einer geschichteten Molekülverteilung	117
7.5 Beobachtbarkeit turbulenter Strukturen mit ALMA	118
7.6 Fazit	121
8 BEWERTUNG UND AUSBLICK	125

IV APPENDIX 127

A WEITERFÜHRENDE DETAILS ZU MOL3D	129
A.1 Entwicklungsgeschichte	129
A.2 Bezug und Verwendung	130
A.3 Untersuchung der Laufzeit	130
A.4 Effektivität der Parallelisierung	131
A.5 Wahl des Zufallszahlengenerators	134
A.6 Vergleich mit Semenov u. a. 2008	136
A.7 Vollständige Flusskarten	136
B NATURKONSTANTEN	143
Literaturverzeichnis	145
Abbildungsverzeichnis	163
Tabellenverzeichnis	171
Danksagung	173
Eidesstattliche Erklärung	175

EINLEITUNG UND EINORDNUNG

Ausgehend von den Planeten unseres Sonnensystems und motiviert durch die in jüngster Zeit stetig zunehmende Anzahl an entdeckten Exoplaneten, stellt die Erforschung der physikalischen Entstehungsgeschichte sowie der Entwicklung von Planeten eine der aktuellen Kernfragen der Astrophysik dar.

Heutzutage gilt es als erwiesen, dass Planeten in nur wenigen Millionen Jahren in Staub- und Gasscheiben um junge Sterne entstehen. Diese sogenannten zirkumstellaren Scheiben sind ein direktes Ergebnis der vorangegangenen Sternentstehung. Allerdings sind die komplexen chemischen und physikalischen Prozesse der Entwicklung von kleinsten Staubkörnern über Planetesimalen bis hin zu Planeten bis heute noch nicht vollständig verstanden. Die genaue Untersuchung und das daraus abgeleitete Verständnis der wirkenden Mechanismen sind daher von elementarer Bedeutung. Insbesondere die Untersuchung des Zusammenspiels von Staub und Gas in den einzelnen Phasen der Scheibenevolution ist dabei Gegenstand der aktuellen Forschung. Zur Analyse der zugrunde liegenden Scheibenphysik sind detaillierte Modellierungen der potenziellen Planetenentstehungsgebiete in protoplanetaren Scheiben in Verbindung mit komplementären, astronomischen Beobachtungen notwendig. Aufgrund der großen Distanzen zu den nahegelegenen Sternentstehungsgebieten sind diese jedoch nur mit modernen Großteleskopen durchführbar. Dabei ermöglicht jede neue Instrumentengeneration, durch die immer aufwendigeren Beobachtungsmethoden, ein immer tiefgreifenderes Verständnis der physikalischen Eigenschaften protoplanetarer Scheiben. Allerdings werfen diese neuen Erkenntnisse auch immer wieder neue Fragestellungen auf.

Bezogen auf die neuesten technischen Entwicklungen sei insbesondere das kürzlich in Betrieb genommene ALMA-Interferometer in Chile genannt. So lieferten schon die ersten ALMA-Beobachtungen der Staubkomponente protoplanetarer Scheiben mit bisher nie erreichter räumlicher Auflösung revolutionäre Erkenntnisse über die Struktur und den Entwicklungszustand junger protoplanetarer Scheiben [ALMA Partnership 2015].

Die Beobachtung der Gaskomponente, welche die Hauptmasse protoplanetarer Scheiben ausmacht, stellt eine besondere technische Herausforderung dar. Im Gegensatz zur Staubbeobachtung im Kontinuum kann das Gas nur in diskreten Linienübergängen beobachtet werden. Durch ALMA ist es möglich, komplementär zum Staub, räumlich aufgelöste Molekülbeobachtungen im (Sub-)Millimeter-Wellenlängenbereich durchzuführen. Mithilfe dieser neuen Beobachtungen ist es möglich, neue Erkennt-

nisse insbesondere über die lokale Zusammensetzung sowie über die Dynamik der Scheiben zu gewinnen, welche die vorhandenen theoretischen Modelle optimieren. Motiviert durch den Zugang zu dieser neuen Technologie wird in dieser Arbeit der folgenden Leitfrage nachgegangen:

Welche Erkenntnisse zu den physikalischen und chemischen Eigenschaften zirkumstellarer Scheiben können aus den räumlich sowie spektral aufgelösten Molekülbeobachtungen zukünftiger Teleskope wie z. B. ALMA abgeleitet werden?

Zu diesem Zweck wird in dieser Arbeit ein Programm entwickelt, das in der Lage ist, die Liniенstrahlung eines gegebenen Scheibenmodells zu simulieren. Die mit diesem Programm erzeugten idealen Bilder können dann zur Analyse oder Vorhersage von realen Beobachtungen genutzt werden. Vor diesem Hintergrund ist die hier vorliegende Arbeit in die drei Teile *Grundlagen*, *Entwicklung* und *Studien* untergliedert. Im ersten Teil wird die Arbeit theoretisch eingeleitet und damit die Grundlage zum Verständnis dieser Arbeit geschaffen. So wird in Kapitel 2 zunächst auf den aktuellen Stand der Theorien zur Entstehung und Entwicklung von den jungen protoplanetaren Scheiben bis hin zu den entwickelten Trümmerscheiben eingegangen. Des Weiteren wird die typische Beobachtung und Modellierung solcher Scheiben vorgestellt. In Kapitel 3 wird das Strahlungstransportproblem dargestellt. Dazu werden die Grundgleichungen und die theoretische Behandlung der Staub- und Gaskomponente abgeleitet. Auch werden die in dieser Arbeit verwendeten Staub- und Molekülmodelle behandelt. Zum Schluss wird die Monte-Carlo-Methode zur eleganten Lösung der Strahlungstransportgleichung skizziert.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wird die Entwicklungsgeschichte des neuen Strahlungstransportprogramms *Mol3D* beschrieben. Es werden die Programmeigenschaften und der Funktionsumfang vorgestellt und die zugrunde liegenden Methoden mit ihren Vor- und Nachteilen erläutert (Kapitel 4). Um sicher zu stellen, dass das Programm korrekt arbeitet und verlässliche Ergebnisse im Rahmen des vorgegebenen Modells produziert, wird ein ausführlicher Benchmark-Test präsentiert und die Ergebnisse der einzelnen Programmteile diskutiert (Kapitel 5).

Im dritten Teil dieser Arbeit wird das entwickelte Programm genutzt, um die Beobachtbarkeit von (großkaligen) Strukturen in protoplanetaren Scheiben zu diskutieren. Dazu wird in Kapitel 6 gezeigt, unter welchen Bedingungen Scheibenlücken mithilfe von Moleküllinien in naher Zukunft mit ALMA zu beobachten sind. Dies geschieht auf Basis von Hydrodynamik-Simulationen, die als Eingabe für das neu entwickelte Strahlungstransportprogramm genutzt werden. Abschließend wird in Kapitel 7 der Fragestellung nachgegangen, ob turbulente Strukturen, die in protoplanetaren Scheiben vorhergesagt werden, mit dem ALMA-Interferometer nachweisbar sein werden. Auf Grundlage von MHD-Simulationen wird hierbei insbesondere die direkte Beobachtbarkeit von lokalen Strömungszellen thematisiert.

Teil I

GRUNDLAGEN

*Falls Gott die Welt geschaffen hat,
war seine Haupt sorge sicher nicht, sie so zu machen,
dass wir sie verstehen können.*

— Albert Einstein

2

ZIRKUMSTELLARE SCHEIBEN

Zirkumstellare Scheiben, die um Vor-Hauptreihensterne (wie z.B. T Tauri- und Herbig Ae/Be-Sterne) gefunden wurden, werden als die Geburtsorte von Planeten und das direkte Ergebnis der protostellaren Evolution betrachtet. Im letzten Jahrzehnt wurden zirkumstellare Scheiben in verschiedenen Evolutionsstadien entdeckt. Da protoplanetare Scheiben für diese Arbeit eine zentrale Rolle spielen, werden in diesem Kapitel die aktuellen Theorien der Scheibenentstehung und Scheibenentwicklung vorgestellt. Im Anschluss wird das ALMA-Interferometer präsentiert sowie das in dieser Arbeit verwendete theoretische Scheibenmodell eingeführt.

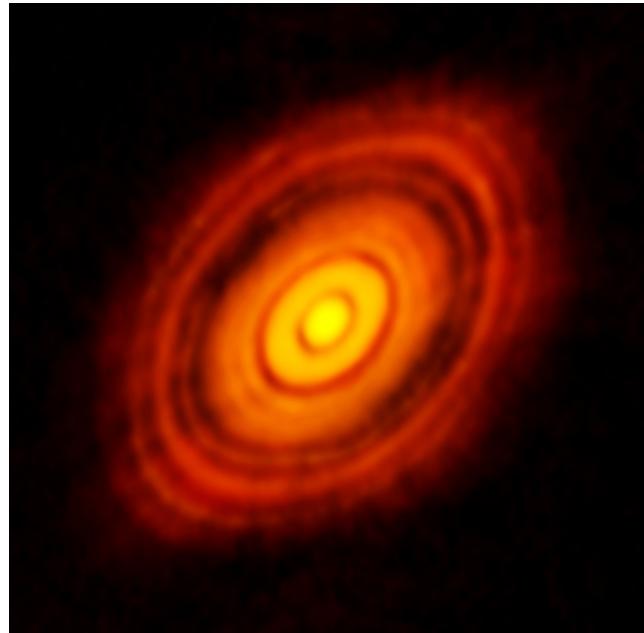


Abbildung 2.1 – 1.3 mm Kontinuum-Beobachtung der protoplanetaren Scheibe um HL Tau mit ALMA [[ALMA Partnership 2015](#)]

2.1 SCHEIBENENTSTEHUNG UND -ENTWICKLUNG

Als Folge des Gravitationskollaps [[Cameron 1962; Shu u. a. 1987](#)] einer kalten und dichten Molekülwolke entsteht zum einen ein Hauptkern, der Protostern. Zum anderen formt sich aufgrund der Drehimpulserhaltung der übriggebliebene Teil der Molekülwolke in einer dünnen Scheibe um den gerade entstehenden Zentralstern an. Diese wird allgemein, unabhängig vom Alter des Systems, als zirkumstellare Scheibe bezeichnet. Eine ausführliche Zusammenfassung der aktuellen Sternentstehungstheorien ist in der Arbeit von [McKee und Ostriker \[2007\]](#) dargestellt. Im letzten Jahrzehnt wurden zirkumstellare Scheiben in verschiedenen Evolutionsstadien entdeckt. Den Erkenntnissen durch Beobachtungen [[Adams u. a. 1987](#)], theoreti-

schen Überlegungen sowie numerischen Simulationen nach hat es sich eingebürgert die zeitliche Entwicklung dieser Scheiben, die etwa 20 Millionen Jahre dauert [z. B. Strom u. a. 1993], in drei Phasen zu unterteilen:

- Protoplanetare Scheiben
- Übergangsscheiben¹
- Trümmerscheiben²

Während der Evolution der Scheibe verändert sich ihre chemische Zusammensetzung sowie ihr räumliches Erscheinungsbild erheblich.

Junge, gerade entstandene protoplanetare Scheiben weisen typischerweise Ausdehnung von mehreren Hundert Astronomischen Einheiten (AE) und einen Massenbereich von etwa $0.001 - 0.1 M_{\odot}$ ³ auf [Andrews und Williams 2005]. Die Masse der Scheiben besteht, wie die ursprüngliche Molekülwolke, zu etwa 99 % aus Gas, großteils (molekularer) Wasserstoff, und nur zu etwa 1 % aus Festkörpern [Hildebrand 1983]. Diese typischerweise Nanometer bis Mikrometer großen Teilchen [Dohnanyi 1969; Mathis u. a. 1977] bestehen in der Regel aus Silikat und Graphit [Weingartner und Draine 2001], weisen wahrscheinlich eine fraktale Struktur auf [z. B. Weidenschilling und Cuzzi 1993; Blum und Wurm 2000; Kirchschlager und Wolf 2014] und werden im Kontext zirkumstellarer Scheiben und dieser Arbeit vereinfacht allgemein als Staub bezeichnet.

Innerhalb weniger Millionen Jahre [z. B. Strom u. a. 1993] verlieren diese jungen Scheiben einen Großteil ihrer ursprünglichen Masse [Haisch u. a. 2001] und entwickeln sich von gasreichen protoplanetaren Scheiben über die namensgebenden Übergangsscheiben [Strom u. a. 1989] hin zu Trümmerscheiben. Dieser Vorgang ist auch als das Auflösen der Scheibe bekannt⁴.

Die Mechanismen, die zur Auflösung und dem mit einhergehenden Verlust der Gasmasse der Scheibe führen, sind vielfältig und ihr Zusammenspiel ist bis heute nicht im Detail geklärt. Insbesondere seien an dieser Stelle die Akkretion auf den Zentralstern [z. B. Hartmann u. a. 1998], der Strahlungsdruck, hervorgerufen durch den Hauptstern [z. B. Burns u. a. 1979] und eventuelle externe Quellen (z. B. benachbarte heiße O-Sterne) sowie Photoevaporation [z. B. Hollenbach u. a. 1994] genannt. Auch führen weitere Effekte, wie der Kelvin-Helmholtz-Mechanismus [Johansen u. a. 2006b] oder die Magnetfeld-Scheibe-Wechselwirkung [Balbus und Hawley 1991, 1998] zu Scheibeninstabilitäten, die potenziell die Auflösung der Scheibe begünstigen.

Der Staub koaguliert im Laufe der Scheibenevolution und sammelt sich in einer dünnen Schicht in der Scheibenmittelebene an [Goldreich und Ward 1973; Weidenschilling 1980]. Durch das Staubkornwachstum [Dullemond und Dominik 2005] und eventuell getrieben durch die Selbstgravitation der Scheibe [Johansen u. a. 2006a; Cuzzi

¹ engl.: transitions disk

² engl.: debris disk

³ Anmerkung: In dieser Arbeit wird die internationale Schreibweise für Dezimalstellen verwendet.

⁴ engl.: disk dispersal

u. a. 2008], entstehen größere Staubkörper bis hin zu Planetesimalen und schließlich Planeten [z. B. Armitage 2010]. Diese wiederum sind in der Lage mit der Scheibe zu wechselwirken [Goldreich und Tremaine 1980], welches zu charakteristischen großskaligen Strukturen wie Scheibenlücken und Spiralarmen (siehe Kapitel 6) führt. Diese genannten Auflöseprozesse haben nur minimale Auswirkungen auf die potenziell entstandenen Planeten in der Scheibe [Wyatt 2008]. Aus diesem Grund bestehen alte zirkumstellare Scheiben, die Trümmerscheiben, fast ausschließlich aus Staub [z. B. Matthews u. a. 2014], der neben gewachsenen Planetesimalen und Planeten auch aus kleineren Teilchen besteht, wie die erstmalige Beobachtung von Millimeter großen Staubkörnern in der Trümmerscheibe um *Alpha Lyrae* [Aumann u. a. 1984] bewiesen hat. Dies lieferte einen direkten Beweis für das Wachstum von Staubkörnern und gibt weiter einen indirekten Hinweis auf kontinuierliche Fragmentation durch Kollisionen von Planetesimalen [Brauer u. a. 2008; Dullemond und Dominik 2008].

Diese hier vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Beobachtbarkeit von jungen protoplanetaren Scheiben durch Molekülübergänge. Aufgrund der oben genannten Auflösungsmechanismen werden daher die Trümmerscheiben im Folgenden nicht weiter betrachtet, auch wenn jüngsten Studien zur Folge auch in diesen Scheiben Gasvorkommen beobachtet wurden [Yang u. a. 2012] und die zuvor vorgestellte starre Klassifizierung somit nicht unbedingt eindeutig ist.

2.2 BEOBACHTBARKEIT

Da es heutzutage und in absehbarer Zeit nicht möglich sein wird astrophysikalische Phänomene außerhalb unseres Sonnensystems vor Ort zu untersuchen⁵, ist die einzige Möglichkeit die physikalischen Gegebenheiten dieser Objekte zu untersuchen, die eintreffende elektromagnetische Strahlung zu analysieren. Auf Grundlage theoretischer Überlegungen und (numerischer) Simulationen werden konsistente Modelle erstellt, die in der Lage sind die Beobachtungen zu reproduzieren und potenzielle zukünftige Beobachtungen zu planen, um die Theorien weiter zu verbessern.

Im Kontext zirkumstellarer Scheiben ist dies die Hauptaufgabe der Arbeitsgruppe *Stern- und Planetenentstehung* an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel und der hier vorliegenden Arbeit. Daher wird an dieser Stelle kurz eingeleitet, wie sich reale und synthetische (simulierte) Beobachtungen miteinander vergleichen lassen.

Unter Annahme einer kreisförmigen Blende wird die räumliche Auflösung, gegeben durch den Winkelabstand φ ($[\varphi] = 1 \text{ rad}$) zweier gerade noch auflösbarer Punktquellen, nach dem Rayleigh-Kriterium [vgl. z. B. Karttunen u. a. 2007] theoretisch nur durch den Durchmesser des Teleskops D und die Wellenlänge λ begrenzt:

$$\sin(\varphi) \approx \varphi \approx 1.22 \frac{\lambda}{D}. \quad (2.1)$$

⁵ Anmerkung: Eine Ausnahme bilden die 1977 gestarteten Voyager-Sonden, <http://voyager.jpl.nasa.gov/>.

An dieser Stelle bietet es sich an, die Punktspreizfunktion (PSF)⁶ einzuführen. Sie beschreibt anschaulich wie eine ideale Punktquelle durch ein optisches System, z. B. ein Teleskop oder Interferometer, abgebildet wird. Die Breite des zentralen Beugungsscheibchens (auch Airy-Scheibchen genannt), ist ein Maß für die räumliche Auflösung. Im idealen Fall, also insbesondere für synthetisch erzeugte Bilder, ergibt sich für den Winkelabstand $\varphi \rightarrow 0$.

Um diese künstlichen Beobachtungen mit realen vergleichen zu können, ist es nötig diese Bilder mit der zugehörigen PSF der Beobachtung zu falten. Mit anderen Worten, das künstlich erzeugte Bild und die PSF werden in den Fourierraum transformiert und dort miteinander multipliziert. Anschließend wird das Ergebnis wieder in den Bildraum transformiert [siehe z. B. [Goodman 2005](#)]. Als Resultat der Faltung ergibt sich, dass Strukturen, die in dem ursprünglichen Bild kleiner als die Halbwertsbreite der PSF sind, in dem resultierenden Bild verschwommen sind und nicht mehr sauber getrennt werden können.

In der Praxis wird die theoretisch zu erwartende räumliche Auflösung bei realen Beobachtungen durch weitere Effekte, z. B. durch die Turbulenzen in den obersten Schichten der Erdatmosphäre (*Seeing*) oder Fehler innerhalb des optischen Systems, begrenzt. Um diese Probleme der (erdgebundenen) Beobachtungen im optischen und (Nah)-Infraroten zu umgehen, wurden Methoden wie die *adaptive* [[Beckers 1993](#)] oder die *aktive* Optik [[Wilson u. a. 1987](#)] eingeführt.

Aufgrund technischer Schwierigkeiten können Einzeltelteleskope nicht unbegrenzt groß gebaut werden. Um dennoch eine bessere räumliche Auflösung zu erreichen, können zwei Teleskope zusammengeschaltet werden und gleichzeitig ein Objekt beobachten. Die maximale Winkelauflösung kann dann bestimmt werden, indem im Rayleigh-Kriterium für D der Abstand der beiden Teleskope eingesetzt wird. Sie bilden ein Interferometer, deren einzelne Signale korreliert werden und der räumliche Kohärenzgrad, auch *Visibility* genannt, bestimmt wird. Nach dem Van-Cittert-Zernike-Theorem (vgl. dazu auch die Arbeit von [Born und Wolf \[1999\]](#)) kann gezeigt werden, dass sich diese aus der Fouriertransformierten der Intensitätsverteilung bestimmen lässt.

Eine ausführliche Einführung zum Thema Interferometrie in der Astrophysik ist in der Zusammenfassung von [Haniff \[2007\]](#) dargestellt.

2.2.1 ALMA

In diesem Abschnitt wird das für diese Arbeit besonders relevante Atacama Large (Sub-)Millimeter Array (ALMA) vorgestellt. Es ist ein revolutionäres neues Interferometer, welches von der ESO betrieben wird, 2011 in Betrieb genommen und 2013 fertig gestellt wurde⁷.

ALMA operiert im (Sub-)Millimeter-Wellenlängenbereich zwischen 0.33 mm und 3.6 mm und besteht aus 66 teilweise mobilen Einzelantennen, wobei 54 einen Durch-

⁶ engl.: Point Spread Function

⁷ siehe <http://www.almaobservatory.org/>

messer von jeweils 12 m aufweisen. Die Antennen lassen sich in verschiedenen Konfigurationen anordnen und ermöglichen so Basislinien von 150 m bis 16 km. Es wurde in etwa 5 000 m Höhe auf der Chajnantor-Hochebene in der Atacamawüste in Chile errichtet. Dieser Standort ist dem benötigten Platz und vor allem den für astronomische Beobachtungen sehr günstigen Wetterbedingungen geschuldet. Aufgrund der Positionierung hoch in den Anden herrschen optimale thermische Bedingungen, da die Erdatmosphäre in dieser Höhe bei einer geringen Luftfeuchtigkeit im relevanten Frequenzbereich hinreichend durchlässig ist.

ALMA eignet sich hervorragend für die direkte Beobachtung von großskaligen Strukturen in protoplanetaren Scheiben. Besonders das Anfang 2015 veröffentlichte Bild (vgl. Abb. 2.1) der protoplanetaren Scheibe um den jungen Vor-Hauptreihenstern HL Tau, das zwischen Oktober und November 2014 im Zuge der Kampagne zur Erforschung der großen Basislinien⁸ aufgenommen wurde, erregte auch außerhalb der wissenschaftlichen Astronomie großes Aufsehen [ALMA Partnership 2015]. Niemals zuvor ist die thermische Reemissionsstrahlung einer protoplanetaren Scheibe bei einer Wellenlänge von 1.3 mm mit solch einer hohen räumlichen Auflösung und Sensitivität beobachtet worden. Die entdeckten zahlreichen Ringe und Scheibenlücken (siehe Abb. 2.1) lassen auf eine weit vorangeschrittene Scheibenentwicklung und indirekt auf Staubkornwachstum und eventuelle Planetenentstehung schließen. Dies ist insofern außergewöhnlich, dass die Beobachtung solcher Strukturen zwar vorhergesagt wurde [z. B. Wolf u. a. 2002; Ruge u. a. 2014], aber die Entwicklung der Scheibe für das junge Alter von nur ~ 1 - 2 Myr [Briceño u. a. 2002] weiter als erwartet vorangeschritten ist. Die detaillierte Analyse dieser und zukünftiger Beobachtungen der Staubkomponente ist daher von besonderer Bedeutung, um ein tiefgreifenderes Verständnis über die physikalischen Vorgänge in protoplanetaren Scheiben zu erlangen. Darüber hinaus wird ALMA auch in der Lage sein die innersten Regionen protoplanetarer Akkretionsscheiben räumlich sowie spektroskopisch mithilfe von Rotationsübergängen auflösen zu können. Damit wird es möglich die molekulare Gaszusammensetzung in den potenziellen Planetenentstehungsgebieten protoplanetarer Scheiben abzuleiten und zu studieren. Dies konnte in den ersten Beobachtungsperioden mit ALMA bestätigt werden [z. B. Qi u. a. 2013; de Gregorio-Monsalvo u. a. 2013; Xu u. a. 2014].

Allerdings befindet sich ALMA immer noch im Ausbau und in der Testphase. Daher werden zur Zeit (Periode 4) nur eingeschränkte Konfigurationen (z. B. vom Beobachtungsband abhängig maximale Basislängen von 10 km) angeboten und die volle Leistungsfähigkeit (räumliche und spektrale Auflösung, uv-Abdeckung, Sensitivität) wird vermutlich erst in einigen Jahren für die Öffentlichkeit zugänglich sein. Daher stellen die Studien im dritten Teil dieser Arbeit (Kapitel 6 und 7) die Grundlagen für zukünftige Beobachtungen mit ALMA dar, die zeigen unter welchen Voraussetzungen Scheibeninhomogenitäten mithilfe von Moleküllinien beobachtet werden können.

⁸ engl.: Long Baseline Campaign

2.3 MODELLIERUNG

2.3.1 Scheibenmodelle

Eine sehr häufig verwendete Beschreibung der Staub- und Gasverteilung zirkumstellarer Scheiben z. B. in den Arbeiten zu HH 30 von [Wood u. a. 2002; Madlener u. a. 2012], dem *Butterfly-Star* IRAS 04302 + 2247 [Gräfe u. a. 2013; Wolf u. a. 2003], PDS 66 [Gräfe und Wolf 2013], CB 26 [Sauter u. a. 2009] oder aber um den Einfluss von porösen Staubteilchen auf die Beobachtungsdaten zu bestimmen [Kirchschlager und Wolf 2014], wurde in der Studie von Shakura und Sunyaev [1973] vorgestellt. Dabei verwenden sie unter anderem die Annahmen, dass die Scheibe radialsymmetrisch und geometrisch dünn ist und die Temperatur in der Vertikalen isotherm ist. In zylindrischen Koordinaten (r, φ, z) kann die Dichteverteilung dann folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\rho(r, z) \propto \left(\frac{r}{100 \text{ AE}} \right)^{-\alpha} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{z^2}{h(r)^2} \right), \quad (2.2)$$

$$h(r) = h_0 \cdot \left(\frac{r}{100 \text{ AE}} \right)^\beta.$$

Dabei beschreibt $h(r)$ den Verlauf der Skalenhöhe, die mit der Größe h_0 bei einer (willkürlich festgelegten) Entfernung von 100 AE skaliert wird. Die Parameter α und β sind für den radialen bzw. vertikalen Verlauf verantwortlich und z gibt die Höhe über der Scheibenmittelebene ($z = 0$) an. Die Oberflächendichte Σ ergibt sich schließlich als Potenzgesetz aus der Integration der Dichte $\rho(r, z)$ entlang der z -Koordinate:

$$\Sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(r, z) dz \propto r^{-p} \quad \text{mit } p = \alpha - \beta. \quad (2.3)$$

Durch die Festlegung eines inneren und äußeren Scheibenradius (R_{innen} bzw. $R_{\text{außen}}$) lässt sich die Scheibenmasse bestimmen.

Unter Annahme einer linearen Beschreibung der Viskosität, wie sie z. B. von Shakura und Sunyaev [1973] eingeführt wurde ($\dot{\alpha}$ -Viskosität), ergibt sich die Kopplung von α und β zu:

$$\alpha = 3 \left(\beta - \frac{1}{2} \right). \quad (2.4)$$

In dieser Arbeit wird das beschriebene analytische Scheibenmodell dazu genutzt, um im zweiten Teil das neu entwickelte Strahlungstransportprogramm *Mol3D* zu testen und verlässliche Aussagen über die korrekte Funktionsweise im Kontext protoplanetarer Scheiben treffen zu können.

2.3.2 CASA

Um simulierte ALMA-Beobachtungen auf Grundlage idealer Flusskarten erzeugen zu können, wird das CASA-Programm⁹ [McMullin u. a. 2007, Version 4.2] genutzt. Die Vorgehensweise basiert auf der offiziellen Anleitung¹⁰ und wird hier kurz beschrieben.

Zuerst wird die *simobserve*-Funktion verwendet, um realistische Messwerte zu generieren. Dabei werden in Abhängigkeit der gewählten Konfiguration (Verteilung der Teleskope), Beobachtungsdauer und -frequenz, sowie der Position des Objektes am Himmel, die zugehörigen uv-Punkte im Fourierraum bestimmt. Aus der Abdeckung des Fourierraums lässt sich wiederum die Punktspreizfunktion der Beobachtung, auch *Beam* genannt, konstruieren. Anschließend werden die idealen Flusskarten gemäß des Van-Cittert-Zernike-Theorems in den Fourierraum transformiert und an den zuvor bestimmten uv-Punkten die Visibilitäten bestimmt.

Das Niederschlagswasser (PWV¹¹) der Atmosphäre hat einen starken Einfluss auf die Beobachtungen. Daher wird in dieser Arbeit für alle durchgeführten CASA-Simulationen der Einfluss des thermischen Rauschens berücksichtigt. Dazu werden die für jede Frequenz bzw. Wellenlänge empfohlenen Säulendichten verwendet. Die angenommenen Werte sind in der Tabelle 6.4 in Kapitel 6 aufgelistet. Im Anschluss werden die zuvor berechneten Visibilitäten mithilfe dieser Werte künstlich verrauscht, um reale Messgrößen zu simulieren.

Im zweiten Schritt wird aus den simulierten ALMA-Beobachtungen, also den Visibilitäten im Fourier- oder Frequenzraum, mithilfe der *simanalyze*-Funktion das Intensitätsbild rekonstruiert. Dabei ist es prinzipiell irrelevant, ob die Visibilitäten aus einer realen oder simulierten Beobachtung stammen. Da nur diskrete Visibilitäten vorliegen ist die Rücktransformation nicht eindeutig. In dieser Arbeit wird der weit verbreitete CLEAN-Algorithmus für die Bildrekonstruktion verwendet [Högbom 1974]. Um das erwartete Rauschlevel σ bestimmen zu können und damit die Signifikanz der Beobachtungen angeben zu können, sind zwei Ansätze denkbar. Theoretisch wäre zum einen die direkte Messung des Rauschens in den (simulierten) Beobachtungskarten möglich. Allerdings hängt die Qualität stark von dem verwendeten Zufaltungsalgorithmus und der Anzahl an uv-Messwerten ab. Aus diesem Grund wird dringend empfohlen¹², das erwartete Rauschlevel mithilfe des *ALMA Sensitivity Calculators*¹³ zu bestimmen. Zudem wird im Rahmen dieser Arbeit die ALMA-Polarisations-Konfiguration immer im *dual-mode* verwendet.

⁹ Common Astronomy Software Application package

¹⁰ siehe <http://casa.nrao.edu/docs/cookbook/index.html>

¹¹ engl.: Precipitable Water Vapor

¹² siehe http://casaguides.nrao.edu/index.php?title=Guide_To_Simulating_ALMA_Data

¹³ siehe <https://almascience.eso.org/proposing/sensitivity-calculator>, Version April 2015

2.4 MOTIVATION DER ARBEIT

Aufgrund von inneren Turbulenzen in protoplanetaren Scheiben, die sich beispielsweise aus gravitativen Scheiben-Instabilitäten während der Planeten-Evolutionsphase [Goldreich und Tremaine 1980; Durisen u. a. 2007] oder durch den Einfluss von schwachen Magnetfeldern [Balbus und Hawley 1998; Flock u. a. 2015] ergeben, werden komplexe, zeitlich variable Strukturen in verschiedenen Größenordnungen vorhergesagt.

Zudem zeigen hydrodynamische Simulationen gasförmiger, viskoser protoplanetarer Scheiben mit eingeschlossenem Protoplaneten, dass ein Planet der Masse $\geq 0.1 M_J$ eine Lücke öffnen und diese auch offen halten kann [z. B. Bryden u. a. 1999; Kley 1999; D'Angelo u. a. 2003]. Diese Scheibenlücke, die entlang des Orbits des eingebetteten Planeten verläuft, kann, abhängig von der Masse, der Lokalisierung des Planeten und den hydrodynamischen Eigenschaften der Scheibe, eine Ausdehnung von mehreren astronomischen Einheiten in der Breite erreichen. Auch können massive Planeten weitere charakteristische Dichte-Störungen wie Spiralarme [Papaloizou und Lin 1984; Klahr und Kley 2006] hervorrufen.

Detaillierte Machbarkeitsstudien zur Aufspürung von großskaligen Scheibenstrukturen (insbesondere Scheibenlücken) in unterschiedlichen Scheibentypen unter Verwendung von simulierten ALMA-Beobachtungen der thermischen Scheibenreemission im (Sub-)Millimeter-Wellenlängenbereich wurden von Gonzalez u. a. [2012] und Ruge u. a. [2013] veröffentlicht.

Motiviert durch die Ergebnisse dieser Studien und die eindrucksvolle Bestätigung der Vorhersagen durch die aktuelle ALMA-Beobachtung von HL Tau [ALMA Partnership 2015], einem sehr jungen Vor-Hauptreihenstern im Sternbild des Stiers (Abbildung 2.1), geht diese Arbeit noch einen Schritt weiter und untersucht den Nutzen von räumlich aufgelösten Beobachtungen von Rotationsübergängen häufig vorkommender Moleküle. Dies erlaubt eine Aussage über die Temperatur-, Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung protoplanetarer Scheiben sowie die Bestimmung der molekularen Häufigkeiten als Funktion der Position in der Scheibe. Aus den Ergebnissen lassen sich dann potenziell die wirkenden physikalischen Prozesse der Scheiben und der Ursprung der beobachteten Scheibeninhomogenitäten und -asymmetrien ergründen und verstehen.

Um die Strahlung von Moleküllinien simulieren und im Anschluss analysieren zu können, wird zu diesem Zweck das Linienstrahlungstransport-Programm *Mol3D* entwickelt (Kapitel 4), welches im Anschluss für Vorhersagen über die Beobachtbarkeit von Lücken in protoplanetaren Scheiben (Kapitel 6) sowie lokalen turbulenten Strömungen (Kapitel 7) eingesetzt wird.

3

STRAHLUNGSTRANSPORT

In diesem Kapitel wird das Strahlungstransportproblem vorgestellt und die grundlegenden Gleichungen (Abschnitt 3.1) eingeführt. Dazu wird in den Abschnitten 3.2 und 3.3 die theoretische Behandlung des Gases und des Staubs vorgestellt, wie sie im Rahmen dieser Arbeit Anwendung findet. Zum Abschluss dieses Kapitels (Abschnitt 3.4) werden die Monte-Carlo-Methode, sowie Strahlungstransportprogramme, die das Strahlungstransportproblem mit dieser eleganten Methode lösen und für die Entwicklung von Mol3D von Bedeutung sind, präsentiert.

Die folgenden Abschnitte sind aus Lehrbüchern [Unsold und Baschek 2002; Karttunen u. a. 2007; Weigert u. a. 2009; Röser u. a. 2012] und aus in Fachzeitschriften publizierten Artikeln zusammengestellt.

3.1 GRUNDGLEICHUNGEN DES STRAHLUNGSTRANSPORTS

Als Grundlage wird von der Strahlungstransportgleichung in der folgenden eindimensionalen und zeitlich unabhängigen Form ausgegangen:

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -k_\nu I_\nu + j_\nu. \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnet ν die Frequenz, $j_\nu(s)$ den Emissions- und k_ν den Extinktionskoeffizienten, der sich additiv aus dem Absorptionskoeffizienten α_ν ¹ sowie dem Streukoeffizienten σ_ν zusammensetzt. Im Allgemeinen sind die Koeffizienten $j_\nu(s)$, α_ν und σ_ν von der Frequenz der einfallenden Strahlung ν sowie den Materialeigenschaften (z. B. chemische Zusammensetzung, Temperatur) der interagierenden Materie abhängig. Die Strahlungsintensität I_ν ist die Energie, die pro Zeiteinheit, Einheitsraumwinkel und Einheitsfrequenzintervall durch eine senkrecht zur Ausbreitungsrichtung stehende Einheitsfläche strömt. Durch die Integration über alle Raumwinkel $d\Omega$ kann die gemittelte Intensität J_ν bestimmt werden. Es gilt:

$$J_\nu = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I_\nu \sin(\theta) d\theta d\phi. \quad (3.2)$$

¹ Anmerkung: In der Literatur wird oftmals der Buchstabe κ verwendet.

Wird weiter die Integration über alle Frequenzen durchgeführt, so ergibt sich die mittlere Gesamtenergie der Strahlung:

$$\bar{J} = \int_0^{\infty} J_{\nu} d\nu. \quad (3.3)$$

In der Praxis bietet es sich an, die Strahlungstransportgleichung zu integrieren. Dann lässt sich die Intensität vom Punkt p_1 nach p_2 entlang der Strecke s wie folgt berechnen:

$$I_{\nu}(p_2) = I_{\nu}(p_1)e^{-\tau_{\nu}(p_1, p_2)} + \int_{p_1}^{p_2} j_{\nu}(s)e^{-\tau_{\nu}(s, p_2)} ds, \quad (3.4)$$

wobei die dimensionslose Größe τ_{ν} die optische Tiefe zwischen zwei Punkten p_1 und p_2 entlang des Sichtstrahls beschreibt:

$$\tau_{\nu}(p_1, p_2) = \int_{p_1}^{p_2} k_{\nu} ds. \quad (3.5)$$

Für die in dieser vorliegenden Arbeit diskutierten Strahlungseffekte ist von besonderer Wichtigkeit, dass im Fall von $\tau_{\nu} \ll 1$ ein Medium als optisch dünn und im Fall von $\tau_{\nu} \gg 1$ als optisch dick bezeichnet wird.

Unter Einführung der Quellfunktion

$$S_{\nu} = \frac{j_{\nu}}{k_{\nu}} \quad (3.6)$$

kann die Strahlungstransportgleichung (Gl. 3.1) in der Form:

$$\frac{dI_{\nu}}{d\tau_{\nu}} = -I_{\nu} + S_{\nu} \quad (3.7)$$

geschrieben werden. An dieser Stelle gilt zu beachten, dass im Fall des thermischen Gleichgewichts (TE) die Quellfunktion der Kirchhoff-Planck-Funktion eines Schwarzkörpers $B_{\nu}(T)$ entspricht. Damit ergibt sich Gleichung 3.6 zu:

$$B_{\nu}(T) = \frac{j_{\nu}}{k_{\nu}}. \quad (3.8)$$

Dieser Fall ist als der Kirchoffsche Satz bekannt.

In dieser Arbeit wird je nach Anwendungsgebiet die Kirchhoff-Planck-Funktion sowohl in der Frequenz- als auch in der Wellenlängendarstellung verwendet:

$$B_{\nu}(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \cdot [e^{h\nu/k_B T} - 1]^{-1}, \quad B_{\lambda}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot [e^{hc/\lambda k_B T} - 1]^{-1}, \quad (3.9)$$

wobei die Umrechnung durch den folgenden Zusammenhang realisierbar ist:

$$\lambda B_{\lambda}(T) = \nu B_{\nu}(T).$$

3.2 DIE BEHANDLUNG DES GASES

Für das Gas, beispielsweise für einen allgemeinen Übergang von einem höheren Zustand i zu einem niedrigen Zustand j , haben der Emissionskoeffizient (j_ν) und der Absorptionskoeffizient (α_ν) die folgende Form:

$$j_{ij}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N n_i A_{ij} \Phi_{ij}(\nu), \quad (3.10)$$

$$\alpha_{ij}(\nu) = \frac{h\nu_{ij}}{4\pi} N (n_j B_{ji} - n_i B_{ij}) \Phi_{ij}(\nu). \quad (3.11)$$

Dabei bezeichnet ν_{ij} die zugehörige zentrale Frequenz des Übergangs von Niveau $i \rightarrow j$, die im Labor bestimmt werden kann. A_{ij} , B_{ij} und B_{ji} sind die Einsteinkoeffizienten für spontane und stimulierte Emission, sowie stimulierte Absorption. n_i bezeichnet die relative Besetzungszahl des i -ten Niveaus und N die Anzahldichte des Atoms oder Moleküls. Dies entspricht dem Ansatz von [Rybicki und Hummer \[1991\]](#) für die Behandlung sich nicht überlappender Übergänge zwischen mehreren Energieniveaus. Die lokale Quellfunktion S_{ij} ergibt sich dann zu:

$$S_{ij} = \frac{j_{ij}}{\alpha_{ij}} = \frac{n_i A_{ij}}{n_j B_{ji} - n_i B_{ij}} \quad (3.12)$$

und ist damit unabhängig von der gewählten Profilfunktion Φ und dem Geschwindigkeitsfeld (vgl. Abschnitt [4.2.4](#)).

Die Kollisionsrate C_{ij} kann aus der Teilchendichte der Kollisionspartner n_{kol} und dem abwärtsgerichteten Kollisionsraten-Koeffizienten γ_{ij} , dem Maxwellschen Mittelwert der Kollisionsquerschnittsflächen σ , berechnet werden:

$$C_{ij} = n_{kol} \gamma_{ij}. \quad (3.13)$$

Die aufwärtsgerichteten Kollisionsraten-Koeffizienten γ_{ji} können anschließend durch die Bilanzierung:

$$\gamma_{ji} = \gamma_{ij} \frac{g_i}{g_j} \exp\left(\frac{-h\nu_{ij}}{k_B T_{kin}}\right) \quad (3.14)$$

berechnet werden. g_i und g_j stehen in diesem Fall für die statistischen Gewichte des ij -Energieniveaus und T_{kin} bezeichnet die kinetische Gastemperatur.

Da in vielen astrophysikalischen Medien die betrachteten Dichten sehr gering sind, kann nicht davon ausgegangen werden, dass sich die Materie im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) befindet. Um letztendlich das vollständige Linien-Strahlungstransportproblem beschreiben zu können, wird daher vom statistischen Gleichgewicht ausgegangen:

$$\begin{aligned} \sum_{i>j} [n_i A_{ij} + (n_i B_{ij} - n_j B_{ji}) \bar{J}_{ij}] - \sum_{i<j} [n_j A_{ji} + (n_j B_{ji} - n_i B_{ij}) \bar{J}_{ji}] \\ + \sum_i [n_i C_{ij} - n_j C_{ji}] = 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Bei genauer Betrachtung fällt auf, dass Gleichung 3.15 einen Satz linear gekoppelter Gleichungen darstellt und zwar für jedes Energieniveau genau eine. Dieses Gleichungssystem wird lokal gelöst, aber es hat einen globalen Charakter, aufgrund der Abhängigkeit von der gemittelten Gesamtintensität \bar{J}_{ij} . Die Abhängigkeit von der Gastemperatur ist in der Temperaturabhängigkeit der Kollisionsraten C_{ij} versteckt. Die Gleichungen 3.15 und 3.3 sind direkt an die Gleichung 3.1 gekoppelt.

Um das Linien-Strahlungstransportproblem zu lösen, muss mit einem Schätzwert (oftmals einfache LTE-Annahme) für die Besetzungszahlen begonnen werden. Im Anschluss muss die Strahlungstransportgleichung gelöst werden, um die gemittelte Gesamtintensität berechnen zu können. Abschließend ist die Gleichung 3.15 erneut zu lösen, um einen neuen Satz an Besetzungszahlen zu generieren. Dieser Vorgang muss solange wiederholt werden, bis die iterierten Besetzungszahlen gegen einen Endwert konvergieren und damit die gesuchten Besetzungszahlen gefunden sind. Auch wenn sich das betrachtete System nicht im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht befindet, bietet es sich an die Anregungstemperatur T_{anr} zu definieren, um die resultierende Verteilung der Besetzungszahlen darstellen zu können und eine Analyse der Strahlungstransportsimulationen zu ermöglichen:

$$T_{anr} = \frac{\hbar v_{ij}}{k_B} \left[\ln \left(\frac{g_i n_j}{g_j n_i} \right) \right]^{-1}. \quad (3.16)$$

Ist dabei T_{anr} höher oder niedriger als die kinetische Gastemperatur T_{kin} , so liegt kein lokales thermodynamisches Gleichgewicht vor. In diesem Fall wird der Anregungszustand als sub- bzw. superthermal bezeichnet.

3.2.1 Molekülubergänge

In dieser Arbeit werden ausschließlich Moleküle betrachtet, deren Rotationsübergänge im (Sub-)Millimeter-Bereich liegen und daher potenziell mit ALMA beobachtet werden können. Auf Rotations-Schwingungs-Übergänge im (Nah-)Infraroten (z. B. das fundamentale CO-Band bei $\sim 4.7 \mu\text{m}$) die beispielsweise mit CRIRES² am VLT³ in Chile beobachtet werden können, wird daher nicht weiter eingegangen.

An dieser Stelle wird ein zweiatomiges Molekül mit der reduzierten Masse $m_r = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ betrachtet. Moleküle, die aus Atomen verschiedener Masse bestehen, z. B. das in der Astrophysik oft beobachtete Kohlenstoffmonoxid (CO), weisen einen permanenten elektrischen Dipol auf. Unter der Annahme, dass das Molekül mit einer Kreisfrequenz ω und einem konstanten Abstand d um seinen Massenschwerpunkt rotiert, ergibt sich für die kinetische Rotationsenergie folgender Ausdruck:

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I}, \quad (3.17)$$

² engl.: Cryogenic High-Resolution Infrared Echelle Spectrograph

³ engl.: Very Large Telescope

wobei $L = m_r d^2 \omega = I\omega$ den Bahndrehimpuls und I das Trägheitsmoment⁴ darstellen. Damit ergibt sich schließlich durch den Übergang zur Quantenmechanik aus den Eigenwerten der Schrödinger-Gleichung die Rotationsenergie $E_{\text{rot},J}$ für die Drehimpulsquantenzahl $J \in [0, 1, \dots]$ zu:

$$E_{\text{rot},J} = \frac{J(J+1)\hbar^2}{8\pi^2 I}, \quad (3.18)$$

und weiter für die Frequenz ν_{JJ-1} eines Übergangs von $J \rightarrow J-1$:

$$\nu_{JJ-1} = \frac{\Delta E_{\text{rot},J}}{\hbar} = \frac{\hbar J}{4\pi^2 I} = \frac{\hbar J}{4\pi^2 m_r d^2}. \quad (3.19)$$

Mithilfe der Rotationsenergie lässt sich weiter die kinetische Gastemperatur $T_{\text{kin,min}}$ abschätzen, die benötigt wird, damit ein Niveau signifikant bevölkert ist. Es gilt in erster Näherung:

$$T_{\text{kin,min}} \approx \frac{E_{\text{rot}}}{k_B} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{8\pi^2 k_B I} = \frac{\hbar \nu_{JJ-1}(J+1)}{2k_B}. \quad (3.20)$$

Damit ergibt sich als Lösung dieser Gleichung, dass für den CO $J = 1 \rightarrow 0$ Übergang bei $\nu_{10} \approx 115.3$ GHz (Gl. 3.19) eine Temperatur von nur etwa 5.5 K notwendig ist. Im Vergleich zum CO-Molekül weist das leichte und symmetrische H₂ nur einen sehr geringen permanenten elektrischen Dipol auf. Daher liegt die minimale Temperatur um den ersten Übergang des molekularen Wasserstoffs anzuregen bei etwa 510 K. Aus diesen theoretischen Überlegungen lässt sich ableiten, dass molekularer Wasserstoff in protoplanetaren Scheiben höchstens in den innersten Scheibenbereichen ($R \ll 1$ AE) angeregt sein kann. Daher sind direkte Beobachtungen der Hauptkomponente protoplanetarer Scheiben nicht ohne Weiteres möglich. Aus diesem Grund bietet es sich an, Kohlenstoff- oder vergleichbare Übergänge zu beobachten, um indirekt auf die Verteilung des Wasserstoffs zurückzuschließen.

3.2.2 Berechnung der Besetzungsgrößen

Wie zuvor angedeutet, liegt das Hauptproblem des Liniенstrahlungstransports in der Bestimmung der Besetzungsgrößen. Anhand der Gleichung des statistischen Gleichgewichts (Gl. 3.15) lässt sich erkennen, dass die Besetzungsgrößen direkt an die gemittelte Gesamtenergie \bar{J} und durch die Kollisionsraten C_{ij} an die Gastemperatur gekoppelt sind. Die Gastemperatur ist für den Fall komplexer Strukturen wie im Falle protoplanetarer Scheiben jedoch unbekannt. Um dieses Problem zu lösen, wurden mehrere Näherungslösungen entwickelt sowie im letzten Jahrzehnt die ersten direkten oder indirekten Monte-Carlo-Methoden vorgestellt, die verlässliche Ergebnisse für zirkumstellare Scheiben liefern.

So bietet sich je nach Anwendung einer der folgenden Algorithmen zur Berechnung

⁴ Anmerkung: Aufgrund der Verwechslungsgefahr mit der Drehimpulsquantenzahl J wird hier das internationale Symbol I anstatt des im deutschen Sprachgebrauch üblichen J gewählt.

der Besetzungszahlen an: lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE), Free-Escape-Probability (FEP) und die Methode der hohen Geschwindigkeitsgradienten (LVG⁵). Wie Pavlyuchenkov u. a. [2007] gezeigt haben, ist im Falle protoplanetarer Scheiben für die am häufigsten vorkommenden Moleküle die LVG eine sehr verlässliche Methode um die Besetzungszahlen zu berechnen. Dieses Verfahren liefert ein sehr gutes Verhältnis zwischen der Recheneffizienz und der Zuverlässigkeit der Ergebnisse. Da diese Methoden für diese Arbeit von grundlegender Relevanz sind, werden sie im Einzelnen vorgestellt.

LTE-Methode

Die einfachste und am weitesten verbreitete Möglichkeit die Besetzungszahlen zu berechnen ist es anzunehmen, dass die Anregungstemperatur T_{anr} gleich der kinetischen Gastemperatur T_{kin} ist. Unter dieser Annahme folgen die Besetzungszahlen einer Boltzmann-Verteilung:

$$\frac{n_i}{n_j} = \frac{g_i}{g_j} \exp\left(\frac{h\nu_{ij}}{kT_{\text{kin}}}\right). \quad (3.21)$$

Als Faustregel können zwei Fälle unterschieden werden, für die die LTE-Annahme gerechtfertigt ist. Dies ist zum einen der Fall, wenn die Wasserstoffdichte deutlich größer als die kritische Dichte n_{krit} des betrachteten Übergangs ist, die sich aus den Einstinkoeffizienten A_{ij} und den Kollisionsraten C_{ik} berechnen lässt:

$$n_{\text{krit}} = \frac{A_{ij}}{\sum_k C_{ik}}, \quad k \leq j. \quad (3.22)$$

Auch ist die LTE-Annahme gerechtfertigt, wenn die optische Tiefe eines Übergangs so hoch ist, dass sich ein perfektes Gleichgewicht zwischen der An- und Abregung der entsprechenden Energieniveaus durch Stöße der Moleküle und Strahlung (spontane bzw. stimulierte Emission und Absorption) einstellt. Zum Beispiel ergibt sich für Kohlenstoffmonoxid und die zugehörigen Isotopologe eine kritische Anzahldichte von etwa 700 cm^{-3} . Diese Voraussetzung ist in protoplanetaren Scheiben gegeben, wie in verschiedenen Studien [z. B. Dartois u. a. 2003] gezeigt werden konnte. Damit ist die LTE-Annahme in guter Näherung gerechtfertigt.

Aufgrund der sehr einfachen Implementierung und der hohen Berechnungsgeschwindigkeit der LTE-Methode, wurde sie in zahlreichen Studien zur Analyse von molekularen Linien verwendet. Oftmals wurde sie auch dann verwendet, wenn die Voraussetzungen nicht unbedingt gegeben waren, aber eine rasche erste Interpretation der Beobachtungsdaten erforderlich war [siehe z. B. Qi u. a. 2003; Aikawa und Nomura 2006].

⁵ Large-Velocity-Gradient

FEP-Methode

Eine prominente Klasse von approximativen Methoden zur Bestimmung der Besetzungszahlen versucht die gemittelte Intensität \bar{J} durch gerechtfertigte Annahmen über die umgebende Materie zu bestimmen. Zu diesem Zweck wird eine Wahrscheinlichkeit β bestimmt, die angibt, ob ein emittiertes Photon dem umgebenden Medium aufgrund der optischen Tiefe des Übergangs entkommen kann. In diesem Formalismus berechnet sich die mittlere Intensität \bar{J} folgendermaßen:

$$\bar{J}_{ij} = (1 - \beta_{ij})S_{ij} + \beta_{ij}J_{ext}(v_{ij}) \quad (3.23)$$

$$0 < \beta_{ij} \leq 1, \quad (3.24)$$

wobei S die lokale Quellfunktion und J_{ext} ein mögliches externes Strahlungsfeld, wie zum Beispiel das interstellare Strahlungsfeld, darstellt. Dieses wird oft der Einfachheit halber durch eine Kombination von abgeschwächten Schwarzkörperstrahlern modelliert [z. B. Mathis u. a. 1983]. Das historisch bedingt bekannteste und oft genutzte Modell ist ein einzelner Schwarzkörperstrahler mit einer Temperatur von 10 000 K, welcher um den Faktor $\sim 1 \cdot 10^{-14}$ abgeschwächt ist [Eddington 1926].

Die einfachste (wenn auch extreme) Annahme ist, dass das emittierte Photon frei die Scheibe verlassen kann, ohne dass es jemals interagiert. Unter diesen Voraussetzungen lässt sich das Linienstrahlungsproblem sehr einfach lösen. β muss nicht berechnet werden, sondern wird konstant auf 1 gesetzt. Die Besetzungszahlen sind dann das Ergebnis der Lösung der statistischen Gleichgewichtsgleichungen für ein transparentes Gas, welches durch ein externes Strahlungsfeld (s. o.) oder durch die kosmische Hintergrundstrahlung bei ~ 2.73 K angeregt wird.

Im Fall der protoplanetaren Scheiben zeigt sich, dass diese Methode nur für die obersten Scheibenschichten oder für Moleküle mit sehr geringen Häufigkeiten anwendbar ist. Da die Wahrscheinlichkeit konstant bleibt und daher keine Iterationen notwendig sind (vgl. hierzu die Ausführungen zur LVG-Methode in Abschnitt 3.2.2), ist die FEP-Methode sehr schnell und nur durch den numerischen Aufwand zur Lösung der Matrixgleichungen 3.15 beschränkt.

LVG-Methode

Im Falle protoplanetarer Scheiben sind die radialen Geschwindigkeitsgradienten gewöhnlich viel größer als die lokalen thermischen Geschwindigkeiten und die mikroturbulenten Geschwindigkeiten (typischerweise 0.1 – 0.2 km/s) [z. B. Weiß u. a. 2005; Castro-Carrizo u. a. 2007]. Daher können Photonen, die in einer bestimmten Scheibenregion emittiert werden, nur lokal mit der Scheibe interagieren und wieder absorbiert werden. Da die LVG-Methode zur selben Klasse wie die FEP-Methode gehört, findet auch an dieser Stelle Gleichung 3.23 zur approximativen Bestimmung der mittleren Intensität Anwendung.

Zur Berechnung der lokalen Quellfunktion müssen die Besetzungszahlen bekannt sein. Als erste Annahme werden diese oft unter Annahme des LTEs berechnet. Die-

sem Ansatz folgend wird β aus der lokalen effektiven optischen Tiefe τ der beobachteten Linie berechnet. Sie ergibt sich zu:

$$\beta_{ij} = \frac{1 - \exp(-\tau_{ij})}{\tau_{ij}}. \quad (3.25)$$

Diese Gleichung wurde für Akkretionsscheiben im Allgemeinen eingeführt [siehe auch [Mihalas u. a. 1978; de Jong u. a. 1980](#)]. Es ist deutlich zu erkennen, dass für sehr geringe optische Tiefen β gegen 1 strebt und die LVG-Methode in die FEP-Methode übergeht. Es sei angemerkt, dass diese Formel speziell für (protoplanetare) Scheiben entwickelt wurde. Für andere Geometrien und Szenarien könnten andere Näherungen bessere Ergebnisse liefern. Beispiele zu diesem Thema sind dazu unter anderem in den Studien von [de Jong u. a. \[1975\]; Osterbrock und Ferland \[2006\]; van der Tak u. a. \[2007\]](#) dargestellt.

Es wird angenommen, dass sich τ aus dem lokalen Absorptionskoeffizienten $\alpha(v_{ij})$ und der Kohärenzlänge ΔL berechnen lässt:

$$\tau_{ij} = \alpha(v_{ij}) \Delta L. \quad (3.26)$$

Da ΔL wiederum in direkter Verbindung mit dem Betrag des lokalen Rotationsgeschwindigkeitsfelds $|V_{rot}|$, der gesamten Linienbreite v_{ges} , der Gasdichte und dem Abstand R vom Rotationszentrum steht, ergibt sich aufgrund geometrischer Überlegungen die optische Linientiefe näherungsweise zu:

$$\tau_{ij} \approx \alpha(v_{ij}) R \sqrt{\frac{2}{3} \frac{v_{ges}}{|V_{rot}|}}. \quad (3.27)$$

Eine ausführliche Herleitung findet sich in der Studie von [Pavlyuchenkov u. a. \[2007, insbesondere Abb. 3\]](#).

Ist die optische Tiefe bestimmt, und damit die gemittelte Intensität, können die Matrixgleichungen der statistischen Gleichgewichtszustände gelöst und die Besetzungszahlen bestimmt werden. Aufgrund der Abhängigkeit der lokalen Quellfunktion S von den Besetzungszahlen müssen die Berechnungen iterativ fortgesetzt werden, bis sich ein stabiler Zustand eingestellt hat. Unter Annahme, dass die ersten Besetzungszahlen mit der LTE-Methode berechnet wurden, sind je nach Abweichung zum lokalen thermodynamischen Gleichgewicht mehr Iterationen nötig. Aus diesem Grund variiert die benötigte Berechnungszeit der LVG-Methode je nach (Scheiben)-Region. Die benötigte Laufzeit ist daher höher als die der FEP- oder LTE-Methode. Dies wird allerdings durch die qualitativ hochwertigeren Ergebnisse aufgewogen.

3.3 DAS VERWENDETE STAUBMODELL

Nach der Behandlung des Gases, wird an dieser Stelle auf das Staubmodell eingegangen, wie es im Rahmen dieser Arbeit seine Anwendung findet. Da das Hauptaugenmerk auf der Linienstrahlung liegt, wird typischer Staub, wie er im interstellaren

Medium zu finden ist, angenommen. Die Staubzusammensetzung und die angenommenen Vereinfachungen werden im Folgenden dargestellt.

Zunächst wird angenommen, dass die Staubteilchen aus homogenen, sphärischen und isotropen Körnern bestehen. Obwohl kürzlich erschienene Studien [Chiar und Tielens 2006; Kirchschlager und Wolf 2014] gezeigt haben, dass Staubkörner vermutlich eine fraktale, irreguläre und poröse Gestalt aufweisen, ist die Annahme kugelförmiger Staubkörner vertretbar [Wolf u. a. 2002], da die Streueigenschaften dieser Staubkörner denen mit fraktalen Oberflächen sehr ähnlich sind [Lumme und Rahola 1994]. Zudem werden keine äußeren Magnetfelder betrachtet, die eine Ausrichtung oder Anordnung der Staubteilchen hervorrufen können.

Typischerweise besteht der Staub im interstellaren Medium aus einer Mischung von astronomischem Silikat und Graphit [Weingartner und Draine 2001]. Seine optischen Eigenschaften werden durch die material- und wellenlängenabhängigen Wirkungsquerschnitte der Streuung C_{streu} , der Absorption und Emission C_{abs} , sowie der Extinktion $C_{\text{ext}} = C_{\text{streu}} + C_{\text{abs}}$ beschrieben. Im Gegensatz zum astronomischen Silikat ist die kristalline Struktur von Graphit hoch anisotrop. Daher wird, wie in vielen Studien [z. B. Sauter u. a. 2009; Madlener u. a. 2012; Gräfe u. a. 2013], die $\frac{1}{3}$ - $\frac{2}{3}$ -Näherung verwendet:

$$C = \frac{2}{3}C(\epsilon_{\text{perp}}) + \frac{1}{3}C(\epsilon_{\text{para}}), \quad (3.28)$$

die die Abhängigkeit von der senkrechten (ϵ_{perp}) und parallelen (ϵ_{para}) Ausrichtung des elektrischen Feldes bezogen auf die Kristallachse für jeden optischen Wirkungsquerschnitt (C_{streu} , C_{abs} , C_{ext}) mit einbezieht. Dieses Modell ist ein direktes Ergebnis der Modellierung der Extinktion des interstellaren Mediums, wie es unter anderem in der Studie von Draine und Malhotra [1993] beschrieben wird.

Es wird davon ausgegangen, dass der Staubkorngrößenverteilung das folgende Potenzgesetz zugrunde liegt:

$$n(a) \propto a^{-d}, \quad \text{mit } a_{\min} < a < a_{\max}. \quad (3.29)$$

Dabei bezeichnet a den Staubkornradius und $n(a)$ die Anzahl der Staubkörner im Intervall $[a, a + da]$. Der Exponent d wird in dieser Arbeit zu $d = 3.5$ festgesetzt. Er ergibt sich aus theoretischen Arbeiten zur Kollisionskaskade [Dohnanyi 1969] und aus Messungen [Mathis u. a. 1977]. Die minimalen und maximalen Staubkornradien werden mit $a_{\min} = 5 \text{ nm}$ und $a_{\max} = 250 \text{ nm}$ angenommen. Diese Werte sind das Resultat der Modellierung der beobachteten, interstellaren Extinktion des interstellaren Staubs [Mathis u. a. 1977]. Dieser Staub ist als MRN-Staub in der Astrophysik bekannt. Aufgrund des Staubkornwachstums in protoplanetaren Scheiben wird der maximale Staubkornradius in vielen Arbeiten als freier Anpassungsparameter angenommen [siehe z. B. Gräfe u. a. 2013; Madlener u. a. 2012; Sauter u. a. 2009].

3.3.1 Gemittelte Staubkorneigenschaften

In der Studie von Wolf [2003b] wurde gezeigt, dass es im Kontext zirkumstellarer Scheiben hinreichend ist, über eine gegebene Staubkorngrößenverteilung zu mitteln

und einen einzelnen Katalog für die verwendeten Staubeigenschaften für den gesamten Strahlungstransport zu verwenden, um diesen so besonders effizient zu gestalten. Diesem Ansatz folgend werden über das gesamte Ensemble gewichtete Mittelwerte für die Wirkungsquerschnitte $C_{\text{streu}, \text{abs}, \text{ext}}$, die Elemente der Streumatrix \mathbf{M} (vgl. Abschnitt 4.2.2) und alle weiteren benötigten Staubeigenschaften verwendet [vgl. auch Martin 1978; Šolc 1980]. Unter Annahme von N_s chemisch unterschiedlichen Staubmaterialien ergibt sich:

$$\begin{aligned}\langle C \rangle &= \sum_{j=1}^{N_s} f_j \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} n(a) C_j(a) da , \\ \langle M \rangle &= \sum_{j=1}^{N_s} f_j \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} n(a) M_j(a) da ,\end{aligned}\quad (3.30)$$

wobei $\langle C \rangle$ stellvertretend für alle Wirkungsquerschnitte (s. o.) steht, f_j den relativen Anteil der jeweiligen j -ten Stauspezies angibt, $n(a)$ die oben definierte Korngrößenverteilung beschreibt und die folgenden Normierungsbedingungen erfüllt sein müssen:

$$\sum_j^{N_s} f_j \int_{a_{\min}}^{a_{\max}} n(a) da = 1, \quad \sum_j^{N_s} f_j = 1 . \quad (3.31)$$

Die Albedo $A \in [0, 1]$ (ein Maß für das wellenlängenabhängige Rückstrahlvermögen), aus der sich eine Aussage über die Wahrscheinlichkeit eines Streuereignisses ableiten lässt, ergibt sich daher zu:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle C_{\text{streu}} \rangle}{\langle C_{\text{ext}} \rangle} . \quad (3.32)$$

Für diese Arbeit wird eine Staubzusammensetzung von 62.5 % astronomischem Silikat, 12.5 % senkrecht sowie 25 % parallel ausgerichtetem Graphit verwendet, welche sich aus den gefundenen relativen kosmischen Häufigkeiten zwischen Silikat und Graphit ableiten lässt. Des Weiteren werden alle optischen Eigenschaften der Staubpartikel unter Verwendung der Mie-Theorie [Mie 1908] mit dem Programm *miex* [Wolf und Voshchinnikov 2004] berechnet, welches auf dem von Bohren und Huffman [1983] vorgestellten Algorithmus basiert. Im Anschluss werden die optischen Eigenschaften der einzelnen Korngrößen nach Gleichung 3.30 gemittelt. Die zugrunde liegenden optischen Daten stammen aus der Arbeit von Weingartner und Draine [2001].

3.4 MONTE-CARLO-STRAHLUNGSTRANSPORT

Bereits im 17./18. Jahrhundert entstanden die ersten Gedankenexperimente von bekannten Mathematikern (z. B. Pascal und später Fermat), um Glücksspiele mathematisch zu erfassen. Das wohl bekannteste Experiment aus dieser Zeit ist das Buffon-sche Nadelproblem. Durch zufällig auf ein Streifen- oder Kachelmuster geworfene

Nadeln (Buffon warf sie über seine Schulter) ist es ihm möglich gewesen die Kreiszahl π zu approximieren. Allerdings stellte Buffon fest, dass das Verfahren zwar sehr elegant ist, aber aufgrund der vielen benötigten Wiederholungen sehr schlecht konvergiert und damit zu damaligen Zeiten wenig praktikabel war.

Erst mit der Entwicklung moderner Computer konnten Wahrscheinlichkeitsrechnungen erstmals in der Wissenschaft effizient eingesetzt werden. So machten Stanislaw Ulam und John von Neumann bei der geheimen Entwicklung der Atombombe während des Zweiten Weltkriegs davon Gebrauch und gaben ihrem Experiment den Namen *Monte-Carlo-Methode*. Dieser Name ist wahrscheinlich auf das bekannte Kasino in Monaco zurückzuführen. Der grundsätzliche Ansatz eines Monte-Carlo-Experiments ist es, ein statistisches Modell zu erstellen, so dass sich das Zufallsergebnis bei vielen Versuchsdurchläufen (Gesetz der großen Zahlen) dem Erwartungswert der gesuchten Größe annähert. Monte-Carlo-Experimente sind nicht dem sogenannten *Fluch der Dimensionalität*⁶ unterworfen und eignen sich daher um komplexe Probleme zu lösen, bei denen direkte Verfahren nicht anwendbar sind. Beispielsweise werden Monte-Carlo-Verfahren bei der numerischen Integration in mehrdimensionalen Räumen benutzt. Meistens ist die Monte-Carlo-Integration schon in zwei Dimensionen effizienter als direkte Verfahren.

An dieser Stelle wird oftmals ein einfaches Beispiel einer Monte-Carlo-Simulation vorgestellt. Insbesondere die Berechnung der irrationalen Kreiszahl π wird aus historischen und exemplarischen Gründen oft angeführt. Dies soll an dieser Stelle jedoch nicht wiederholt werden. Dem interessierten Leser sei daher z. B. die Diplomarbeit von Ober [2011] oder die Dissertation von Madlener [2013] nahegelegt.

3.4.1 Pseudozufallszahlen

Als Pseudozufallszahlen werden Zahlenreihen bezeichnet, die z. B. mit einem Computer, also mit einem deterministischen Algorithmus, berechnet werden und daher nur für eine bestimmte Anzahl an Zahlen, der sogenannten Periode, zufällig aussehen. Da die Güte der Zufallszahlen existenziell für Monte-Carlo-Experimente ist, werden hier kurz verschiedene Berechnungsalgorithmen, die sogenannten Pseudozufallszahlengeneratoren, vorgestellt.

Die historisch bedingt weit verbreitetste Klasse von Pseudozufallszahlengeneratoren ist die der linearen Kongruenzgeneratoren. Sie erzeugen eine Reihe ganzer Zahlen⁷ X_i gemäß der folgenden Vorschrift:

$$X_i = (a \cdot X_{i-1} + c) \text{ MOD } m, \quad (3.33)$$

wobei mit MOD die Funktion zur Berechnung des Divisionsrestes gemeint ist. a , c und m sind ganzzahlige Parameter und m bezeichnet den Modulo. Die Wahl dieser Parameter ist maßgeblich für die Güte des Generators verantwortlich. Aus dieser Zahlenfolge wird durch $\xi_i = X_i/m$ eine Zufallszahl im halboffenen Intervall $[0, 1)$

⁶ engl: curse of dimensionality

⁷ engl.: integer

erzeugt. Diese Klasse von Pseudozufallszahlengeneratoren ist aufgrund der Einfachheit in vielen Programmen und Bibliotheken zu finden (z. B. der RANDU-Generator von IBM).

Allerdings weisen diese Generatoren gravierende Mängel auf und fallen bei vielen statistischen Tests durch [L'Ecuyer und Simard 2007], insbesondere wenn der Modulo als Zweierpotenz (z. B. 2^{32} für 32-Bit Integer) gewählt wird. So ist es zum Beispiel möglich durch die Beobachtung einzelner Sequenzen die Parameter a und c abzuleiten. Daher werden diese Generatoren nicht für kryptografische Zwecke verwendet und sollten auch nicht bei Simulationen zur Anwendung kommen, die auf statistischen Methoden basieren.

Eine Weiterentwicklung stellen die mehrfach rekursiven Generatoren (MRG) dar, welche eine Reihe ganzer Zahlen X_i gemäß der folgenden rekursiven Vorschrift berechnen:

$$X_i = \left(\sum_{k=1}^i (a_k * X_{i-k}) + c \right) \text{ MOD } m. \quad (3.34)$$

Ein bekannter Vertreter ist beispielsweise der MRG32k3a-Generator [L'Ecuyer 1996b, 1999a], welcher bis heute alle statistischen Tests bestehen konnte. Allerdings sind die MRG-Generatoren aufgrund der aufwendigeren zugrunde liegenden Rechenoperationen deutlich langsamer als vergleichbare moderne Generatoren.

Eine solche moderne Klasse stellen die sogenannten linear rückgekoppelten Schieberegister-Generatoren (LFSR⁸) dar. Diese Generatoren sind dafür bekannt, dass sie ähnliche statistische Schwächen wie die linearen Kongruenzgeneratoren aufweisen und müssen deshalb geschickt kombiniert werden. Zu dieser Klasse gehört auch der 1997 von Matsumoto und Nishimura [1998] vorgestellte Mersenne-Twister (MT). Er basiert auf der Mersenne-Primzahl $2^{19937}-1$, welche auch gleichzeitig die Periode des Generators darstellt. Aufgrund der sehr langen Periode und der zu damaligen Verhältnissen sehr guten statistischen Eigenschaften, ist der MT der standardmäßig verwendete Zufallszahlengenerator in sehr vielen (quelloffenen⁹) Projekten (z. B. Python, MATLAB, IDL).

Ein weiterer Vertreter dieser Klasse ist der *Combined Tausworthe*-Generator [L'Ecuyer 1996a]. Er weist eine Periode von 2^{88} auf und basiert auf einer Kombination von drei linear rückgekoppelten Schieberegister-Generatoren. Da dieser Generatortyp nur die elementaren Bit-Operationen *SHIFT* und *XOR* verwendet, arbeitet er sehr schnell und ist sehr einfach zu implementieren. Basierend auf diesem Algorithmus existieren verschiedene Varianten, die durch die Kombination von weiteren linear rückgekoppelten Schieberegister-Generatoren auch deutlich längere Perioden aufweisen [siehe L'Ecuyer 1999b]. Diese Generatorfamilie ist im Vergleich zum MT weniger verbreitet, jedoch benötigt sie deutlich weniger Speicher, ist sehr leicht zu implementieren und bietet eine ähnliche Qualität der Zufallszahlen.

Es hat sich im Laufe der Jahre gezeigt, dass jeder Pseudozufallszahlengenerator

⁸ engl.: Linear Feedback Shift Register

⁹ engl.: open source

Schwachstellen aufweist, die charakteristisch für die jeweilige Generatorenklasse sind. Um dieses Problem zu umgehen, wurde von führenden Experten eine Kombination der verschiedenen Generatorklassen vorgeschlagen. Der wohl bekannteste Algorithmus dieser Herangehensweise ist der von George Marsaglia erfundene KISS¹⁰-Generator. Er kombiniert einen linearen Kongruenzgenerator mit einem dreifachen rückgekoppelten Schieberegister-Generator und zwei 16-Bit-Multiplikation mit Vorsorge¹¹-Generatoren. Der Algorithmus hat eine Periode von 2^{123} , arbeitet sehr schnell und hat alle in der TestU01-Bibliothek [L'Ecuyer und Simard 2007] definierten statistischen Tests bestanden.

Gemein haben alle vorgestellten Generatoren, dass sie einen oder mehrere Startwerte, die sogenannte Saat¹², zur Initialisierung benötigen. Die Wahl des Startwertes ist nicht unkritisch, da alle folgenden Zahlen auf diesem Ausgangswert basieren. Allerdings reicht es in der Regel aus, positive ganzzahlige Werte zu wählen, oder diese z. B. mit einem linearen Kongruenzgenerator zu berechnen. Für eine vorgegebene Saat produzieren alle Generatoren ihre (eigene) immer identische Reihe an Zufallszahlen.

3.4.2 Das fundamentale Prinzip

Unter dem fundamentalen Prinzip eines Monte-Carlo-Experiments versteht man das Auslosen einer Zufallsgröße, welches im Folgenden erläutert wird. Der Funktionsverlauf $P(x)$ einer numerischen Zufallsvariable x sei auf einem Definitionssintervall $[a,b]$ gegeben. Dann lässt sich mit

$$F(x_0) = \frac{\int_a^{x_0} P(x) dx}{\int_a^b P(x) dx} \quad (3.35)$$

die zugehörige Verteilungsfunktion F der Größe x berechnen. Durch die Festlegung auf den Definitionsbereich $[a,b]$ und die Normierung über das Integral, ergibt sich, dass $F(x)$ von $F(a) = 0$ bis $F(b) = 1$ streng monoton steigend ist. $F(x_0)$ entspricht damit der Wahrscheinlichkeit $P(x \leq x_0)$.

Wie später noch genauer erläutert wird, kann beispielsweise durch die Anwendung von Gleichung 3.35 jedem (diskreten) Spektrum (z. B. ein schwarzer Strahler, Abbildung 3.1 oben), welches auf einem Definitionssintervall durch gegebene minimale und maximale Wellenlängen $[\lambda_a, \lambda_b]$ charakterisiert ist, eine Wahrscheinlichkeitsverteilung (Abbildung 3.1 unten) zugeordnet werden. Um eine Wellenlänge λ_0 aus der gegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung auszuwählen, muss diese invertiert werden:

$$\lambda_0 = F^{-1}(\xi). \quad (3.36)$$

¹⁰ engl.: Keep It Simple, Stupid

¹¹ engl.: multiply-with-carry

¹² engl.: seed

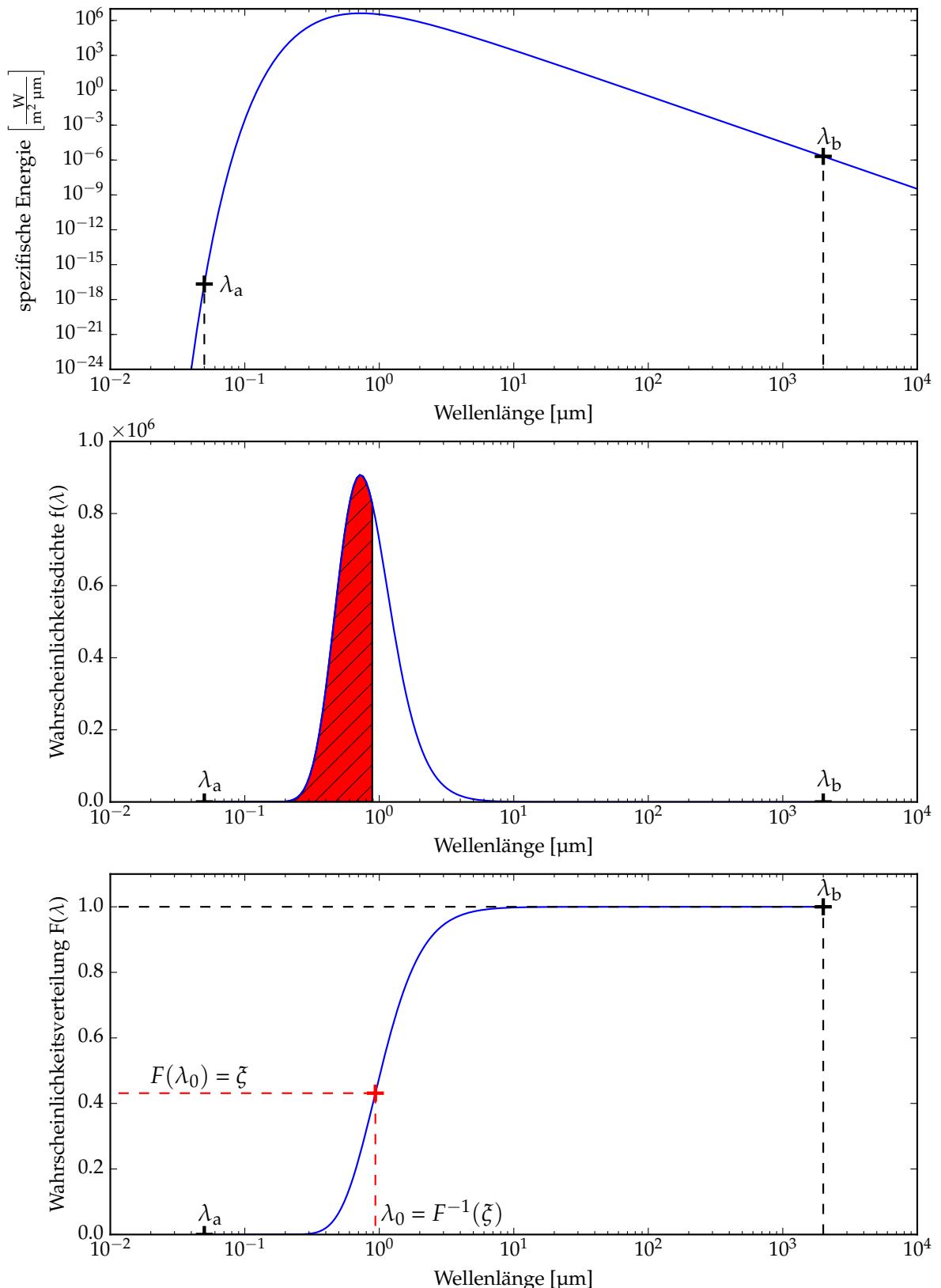


Abbildung 3.1 – Definition der aus einem Schwarzkörperstrahler (oben) resultierenden Wahrscheinlichkeitsdichte (Mitte) und Wahrscheinlichkeitsverteilung (unten).

Durch das Ziehen einer Zufallszahl ξ aus dem halboffenen Intervall $[0,1]$ ¹³ und das (numerische) Lösen von Gleichung 3.36 kann die gesuchte Wellenlänge λ_0 bestimmt werden. Man spricht dann vom Auslosen einer Zufallsgröße. Dabei entspricht die Wahrscheinlichkeit $F(\lambda_0) = P(\lambda \leq \lambda_0)$ der Fläche unter der Wahrscheinlichkeitsdichte (vgl. Abbildung 3.1 Mitte).

3.4.3 Strahlungstransportprogramme

In diesem Abschnitt werden exemplarisch zwei Computerprogramme vorgestellt, die das Strahlungstransportproblem zum einen im Kontinuumsfall (MC₃D), zum anderen im Linienfall (URANIA) lösen. Beide Programme dienen als Referenz bei der Überprüfung des im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelten Strahlungstransportprogramms *Mol3D*, welches in Teil II ausführlich vorgestellt wird.

MC₃D

MC₃D [Wolf u. a. 1999; Wolf 2003a] ist ein 3D Kontinuum-Strahlungstransportprogramm, welches die namensgebende Monte-Carlo-Methode verwendet. Diese wird unter anderem dazu genutzt, konsistent zu einer vorgegebenen Staubverteilung die Staubtemperatur einer protoplanetaren Scheibe zu berechnen. Dazu werden die Konzepte zur sofortigen Temperaturanpassung [Bjorkman und Wood 2001] und kontinuierlichen Absorption Lucy [1999b] verwendet. Für die Behandlung der anisotropen Streuung der Photonen an den Staubteilchen wird Mie-Theorie verwendet und der implementierte Algorithmus basiert auf den Ausführungen von Fischer [1992].

Weiter ist es möglich Reemissions- und Streukarten sowie spektrale Energieverteilungen zu berechnen. Hierzu kann entweder wieder ein Monte-Carlo-Verfahren oder aber für die Berechnung der thermischen Reemissionsstrahlung ein Strahlenverfolgungs-Algorithmus eingesetzt werden. Dabei wird der Stokes-Formalismus verwendet, der es erlaubt, den Polarisationszustand der beim Beobachter eintreffenden Strahlung zu analysieren. Weitere, tiefergehende Details zu den verwendeten Methoden sind in den Abschnitten zur Entwicklung von *Mol3D* (Kapitel 4) enthalten.

MC₃D wurde mit ähnlichen Kontinuum-Strahlungstransportprogrammen verglichen und erfolgreich gegen diese getestet [siehe z. B. Pascucci u. a. 2004]. In den letzten 15 Jahren wurde es in zahlreichen Strahlungstransportstudien eingesetzt, fortlaufend für neue Fragestellungen angepasst und erweitert.

Am häufigsten wurde das Programm dazu benutzt, hochauflöste Multiwellenlängen-Beobachtungen von zirkumstellaren Scheiben [siehe Schegerer u. a. 2008; Sauter und Wolf 2011; Madlener u. a. 2012; Gräfe und Wolf 2013] zu modellieren oder für kommende Beobachtungen auf Grundlage von theoretischen Modellen Vorhersagen treffen zu können [Ruge u. a. 2013, 2014; Flock u. a. 2015]. Auch wurde es für viele weitere theoretische Studien verwendet, um z. B. den Einfluss poröser oder klumpiger Staubkörner [Kirchschlager und Wolf 2014; Brauer und Wolf 2015] zu

¹³ Anmerkung: Für diese Arbeit wird angenommen, dass alle Zufallszahlen ξ diesem Intervall entstammen, sofern nicht explizit darauf hingewiesen wird.

untersuchen oder die Polarisation ausgerichteter elongierter Staubkörner¹⁴ von Bok-Globulen [Bertrang u. a. 2014] vorherzusagen und auszuwerten.

URAN(IA)

URAN(IA) [Pavlyuchenkov und Shustov 2004] ist ein zweidimensionales Strahlungstransportprogramm, welches die Emission und Absorption von Moleküllinien berechnen kann. Es besteht aus zwei Teilen, die jeweils als eigenständige Programme genutzt werden können.

Zunächst werden mit URAN für ein vordefiniertes Modell (Dichte-, Temperatur- und Geschwindigkeitsprofil) die Besetzungszahlen des betrachteten Moleküls berechnet. Für diesen Zweck steht eine beschleunigte Monte-Carlo-Methode zur konsistenten Berechnung der über alle Frequenzen und Raumwinkel gemittelten Intensität \bar{J} (siehe Kapitel 3.2) und damit der Besetzungszahlen zur Verfügung. Der in URAN verwendete Algorithmus basiert auf der ursprünglich von Hogerheijde und van der Tak [2000] vorgestellten Implementierung mit leichten Optimierungen für eine effizientere Berechnung.

Im Zuge der umfangreichen Vergleichsstudie von Pavlyuchenkov u. a. [2007] sind zudem eine Vielzahl an Methoden zur näherungsweisen Berechnung der Besetzungszahlen implementiert worden. Es konnte die Anwendbarkeit dieser Methoden im Kontext von protoplanetaren Scheiben nachgewiesen und mit der zeitaufwendigen Monte-Carlo-Lösung, die als Referenz betrachtet wurde, verglichen werden. Unter anderem wurde gezeigt, dass die Methode der hohen Geschwindigkeitsgradienten (LVG, siehe Abschnitt 3.2.2) in solchen Umgebungen insbesondere für Moleküle mit geringer Elementhäufigkeit und hohen Übergängen sehr gute Ergebnisse in sehr kurzer Zeit ermöglicht.

Der zweite Programmteil, URAN(IA), ermöglicht mithilfe der zuvor ermittelten Besetzungszahlen, die Berechnung von Geschwindigkeitskarten und die Erzeugung von Linienspektren. Dazu wird ein speziell für Moleküllinien angepasster Strahlungsverfolgungsalgorithmus verwendet.

Auch wurde URAN(IA) ausführlich in 1D und 2D getestet, z. B. gegen das Linienstrahlungstransportprogramm RATRAN [Hogerheijde und van der Tak 2000]. Auch hat URAN(IA) alle Testfälle bestanden, die in der Benchmark-Studie für N-LTE Liniенstrahlungstransportprobleme formuliert sind [van Zadelhoff u. a. 2002].

Ferner wurde URAN(IA) erfolgreich bei der Beantwortung astrophysikalischer Fragen eingesetzt. So wurde der Code beispielsweise bei der Modellierung des sternlosen Kerns¹⁵ L1544 [Pavlyuchenkov und Shustov 2004] sowie in zugehörigen Parameterstudien bei der Fragestellung der Entstehung von Moleküllinien in prästellaren Kernen [Pavlyuchenkov u. a. 2008] verwendet.

¹⁴ Anmerkung: Dazu sind spezielle Anpassungen von MC3D nötig.

¹⁵ engl.: starless core

Teil II

ENTWICKLUNG EINES LINIEN-STRAHLUNGSTRANSPORTPROGRAMMS

*Wir müssen die Natur nicht als unseren Feind betrachten,
den es zu beherrschen und überwinden gilt,
sondern wieder lernen, mit der Natur zu kooperieren.
Sie hat eine viereinhalb Milliarden lange Erfahrung.
Unsere ist wesentlich kürzer.*

— Hans-Peter Dürr

4

THEORETISCHE ABLEITUNG

Dieses Kapitel behandelt die Entwicklungsgeschichte des neuen Linien- und Kontinuum-Strahlungstransportprogramms *Mol3D*. Es werden die Entwicklungsziele und Vorgaben sowie die Eigenschaften und Fähigkeiten des Programms vorgestellt und deren konkrete Umsetzung diskutiert.

4.1 VORGABEN UND ZIELE DER ENTWICKLUNG

Mol3D ist ein Programm, welches das Strahlungstransportproblem (siehe Abschnitt 3) mithilfe der Monte-Carlo-Methode (Abschnitt 3.4) löst. Es ist aufgrund der benötigten numerischen Effizienz in *Fortran* geschrieben und kann als Nachfolger des 3D Kontinuum-Strahlungstransportprogramms *MC3D* (vlg. Abschnitt 3.4.3) angesehen werden, auf dem es ursprünglich basiert und durch welches es stark geprägt ist. Allerdings kann *Mol3D* im Gegensatz zu *MC3D* das Strahlungstransportproblem sowohl für die Kontinuumsstrahlung als auch für die Linienstrahlung von (Rotations-) Molekülübergängen berechnen.

Die weiteren Eigenschaften werden im Detail in den folgenden Abschnitten dargestellt. Eine Übersicht zur Entwicklungsgeschichte, weiterführende Informationen zum Auslieferungsumfang und Bezug von *Mol3D* sowie weitere technische Details sind in Anhang A dargestellt.

4.2 EIGENSCHAFTEN VON MOL3D

Mol3D ist ein parallelisiertes Linien- und Kontinuum-Strahlungstransportprogramm, welches eine Monte-Carlo-Methode zur Lösung des Strahlungstransportproblems verwendet. Das zugrunde liegende dreidimensionale Gitter kann wahlweise in sphärischen (Standard), zylindrischen oder kartesischen Koordinaten definiert werden. Die Ausdehnung der einzelnen Zellen kann dabei frei gewählt werden. Typische Möglichkeiten die Zelldimensionen analytisch vorzugeben, logarithmisch oder linear, sind implementiert und ohne weitere Anpassung des Quellcodes verfügbar. Auch können sehr einfach Zellen willkürlicher Ausdehnung angenommen werden. So kann beispielsweise die Region um einen in der Scheibe eingebetteten Planeten mit erhöhter Auflösung simuliert werden.

Die meisten Modellparameter wie die Dichte oder die Temperatur werden in einer Zelle als konstant angenommen. Eine Ausnahme bildet die Rotationsgeschwindigkeit. Sie wird an jedem Punkt im Modellraum analytisch berechnet, entweder durch eine vorgegebene analytische Profil-Funktion (z. B. Kepler-Rotation) oder durch Interpolation benachbarter Gitterzellen.

Mol3D ist in der Lage die Strahlungstransportgleichung (siehe Abschnitt 3.1) für eine vorgegebene, komplexe, dreidimensionale Staubverteilung zu lösen und damit die Staubtemperatur unter Annahme des thermischen Gleichgewichts zu bestimmen. *Mol3D* benutzt vortabellierte, über ein ganzes Ensemble gemittelte Staubeigenschaften (z. B. C_{abs} , C_{streu}), die mit externen Programmen wie *miex*, welches auch Bestandteil von MC₃D ist, oder DDSCAT [Draine und Flatau 1994, 2008] berechnet werden können. Die Behandlung des Staubs wird im Detail in Abschnitt 3.3 beschrieben.

Um Geschwindigkeitskarten, Linienspektren, Kontinuumskarten und spektrale Energieverteilungen (SED¹) mit *Mol3D* zu erzeugen sind typischerweise² drei Schritte notwendig. Zunächst wird die Staubtemperatur unter der Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts mithilfe der Monte-Carlo-Methode berechnet (vgl. Abschnitt 4.2.3). Um eine hoch effiziente und rauscharme Lösung zu erzeugen, wird dazu die kontinuierliche Absorptionsmethode [Lucy 1999a] in Kombination mit der sofortigen Temperaturanpassung nach Bjorkman und Wood [2001] der Scheibe nach jedem Absorptions- oder Emissionsvorgang verwendet.

Im zweiten Schritt werden die Besetzungszahlen der betrachteten Moleküle bestimmt. Wie in Abschnitt 3.2.2 diskutiert, stellt dies das Hauptproblem des Linien-Strahlungstransports dar. Im Falle zirkumstellarer Scheiben kann dieses Problem jedoch deutlich vereinfacht werden, indem adäquate Näherungsmethoden verwendet werden. *Mol3D* ermöglicht es, die Besetzungszahlen mit der LTE-Methode, der FEP-Methode oder mit der LVG-Methode zu bestimmen (vgl. Abschnitt 3.2.2). Es konnte gezeigt werden, dass das lokale thermodynamische Gleichgewicht eine verlässliche Annahme für niedrigere Übergänge von Molekülen großer Häufigkeit ist. Besonders für hohe Übergänge komplexer Moleküle mit geringerer Häufigkeit wird jedoch empfohlen, die LVG-Methode zu benutzen [Pavlyuchenkov u. a. 2007].

Im dritten Schritt werden mithilfe eines neuen, effektiven Strahlungsverfolgungsalgorithmus Geschwindigkeitsspektren oder Geschwindigkeitskarten erzeugt. Hierbei muss berücksichtigt werden, dass die Emissions- und Absorptionskoeffizienten der Gaskomponente in einer einzelnen Zelle aufgrund der Abhängigkeit vom Geschwindigkeitsfeld (siehe Abschnitt 3.2) nicht konstant sind. Da das Programm die Strahlungstransportgleichung für Gas und Staub gleichzeitig löst, müssen daher die optischen Eigenschaften beider Komponenten einbezogen werden. Aus diesem Grund wurde für die Intensitätsintegration ein eingebetteter Runge-Kutta-Fehlberg-Löser der 4. und 5. Ordnung mit automatischer Schrittweitenkontrolle implementiert. Die Vorgehensweise dieser Methode wird in Abschnitt 4.2.5 im Detail diskutiert.

¹ engl.: Spectral Energy Distribution

² Anmerkung: Je nach Anwendungsfall kann die Vorgehensweise verändert oder angepasst werden.

4.2.1 Bestimmung des Photonewegs

In diesem Abschnitt werden die mathematischen Grundlagen, die den Transport eines Photonen-Pakets durch den Modellraum beschreiben, dargestellt. Unter dem Begriff des Modellraums wird in dieser Arbeit allgemein eine komplexe, zirkumstellare Gas- und Staubstruktur wie eine protoplanetare Scheibe verstanden. Ein Photonen-Paket, kurz als Photon bezeichnet, wird im Folgenden durch seine Energie, seinen Stokes-Vektor und seine Wellenlänge eindeutig charakterisiert.

Zunächst wird eine Strahlungsquelle bestimmt, von der das Photon emittiert wird. Dazu wird jeder Strahlungsquelle anhand ihrer Leuchtkraft eine Wahrscheinlichkeit zugeordnet und anschließend eine Zufallszahl gezogen. Für ein typisches Anwendungsszenario im Kontext von protoplanetaren Scheiben ist die einzige Strahlungsquelle der zentrale Stern. In diesem Fall ist die Wahrscheinlichkeit, dass diese Quelle gezogen wird, konsequenterweise eins. Auch zusätzliche Strahlungsquellen (z. B. ein Binärsystem oder ein eingebetteter Planet) lassen sich in *Mol3D* ohne zusätzlichen Aufwand direkt während der Initialisierungsphase definieren.

Ist die emittierende Quelle bestimmt, wird die Energie und die Wellenlänge des Photons berechnet. Die Wellenlänge ergibt sich direkt aus dem definierten Spektrum der Strahlungsquelle. Das normierte Spektrum wird als Wahrscheinlichkeitsfunktion angesehen und mithilfe einer zufälligen Zahl $\xi \in [0, 1]$ wird eine Wellenlänge λ_0 ausgelost. Es gilt für einen schwarzen Strahler:

$$\xi = \frac{\int_0^{\lambda_0} B_\lambda(T_i) d\lambda}{\int_0^\infty B_\lambda(T_i) d\lambda}. \quad (4.1)$$

Diese Formel kann numerisch nach λ_0 invertiert und damit die Wellenlänge bestimmt werden. In der Praxis (und in *Mol3D*) wird das Integral für einen vorgegebenen Wellenlängenbereich $[\lambda_a, \lambda_b]$ vor Beginn der Simulation tabelliert und diese Tabelle mit einem geeigneten, effizienten Verfahren (binäre Suche in *Mol3D*) durchsucht. Dieses Vorgehen erlaubt es zudem, dass beliebige vortabellierte Stern- oder allgemeiner Quellspektren vorgegeben werden können und *Mol3D* nicht nur auf Schwarzkörperspektren beschränkt ist.

Diese statistische Vorgehensweise ermöglicht es zudem, die Energie ϵ , welche ein Photon mit sich trägt, konstant zu halten. Unter dieser Annahme gilt:

$$\epsilon = \frac{L_{\text{ges}} \cdot \Delta t}{N_{\text{phot}}}, \quad (4.2)$$

wobei mit $L_{\text{ges}} \cdot \Delta t$ die gesamte emittierte Energie des Systems in der Zeitspanne von einer Sekunde und mit N_{phot} die Anzahl der Photonen bezeichnet wird. Basierend auf dem sogenannten Emissionskonzept der Strahlungsquelle wird anschließend ein Photon emittiert. Ist die Ausdehnung der Quelle klein gegenüber dem Modellraum, so kann die Quelle als isotroper Strahler angesehen werden. Die Richtung des Photons wird in sphärischen Koordinaten im Bezugssystem des Photons durch die Winkel $\theta \in [0, \pi]$ und $\phi \in [0, 2\pi]$ beschrieben. Dabei beschreibt $\theta = 0$ die positive z-Achse,

$\theta = \pi/2, \phi = 0$ die positive x-Achse, und $\theta = \pi/2, \phi = \pi/2$ die positive y-Achse. Mit Hilfe zweier Zufallszahlen $\xi_{1,2}$ lässt sich die Richtung des Photons in diesem Fall wie folgt berechnen:

$$\cos \theta = 1 - 2\xi_1 \quad (4.3)$$

$$\phi = \xi_2 \cdot 2\pi. \quad (4.4)$$

Mol3D ist dabei im Hinblick auf vielfältige, zukünftige Einsatzgebiete so entworfen, dass es ohne großen Aufwand um weitere Emissionskonzepte, wie z. B. räumlich aufgelöste Quellen, Randverdunklungen von Sternen, Sonnenflecken oder diffuse Medien erweitert werden kann.

Das Photon wird mit einem auf eins normierten Stokes-Vektor, d. h. vollständig unpolarisierte Strahlung, initialisiert:

$$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Es bewegt sich in die ausgeloste Richtung, bis es mit dem Medium interagiert, also gestreut oder absorbiert wird. Wie weit sich das Photon ohne Interaktion durch das Medium bewegt, wird durch die optische Tiefe, die das Photon auf seinem Weg widerfährt, beschrieben. Die gesuchte optische Tiefe wird wiederum durch eine weitere Zufallszahl ξ berechnet. Sie ergibt sich nach dem fundamentalen Prinzip (Abschnitt 3.4.2) [vgl. z. B. [Wolf 2003a](#); [Whitney 2011](#)] und der in dieser Arbeit gültigen Annahme, dass die Zufallszahl ξ aus dem halboffenen Intervall $[0, 1]$ stammt, zu:

$$\tau = -\ln(1 - \xi). \quad (4.6)$$

Wird die so ausgeloste optische Tiefe erreicht, wird das Photon entweder am Staub gestreut oder absorbiert. Auch dies wird wiederum durch eine Zufallszahl ξ ausgelöst. Ist ξ kleiner als die Albedo des Staubs bei der Wellenlänge des Photons, so wird das Photon gestreut, andernfalls wird es absorbiert. Aufgrund des verwendeten Verfahrens nach [Lucy \[1999a\]](#) wird das Photon durch einen Absorptionsvorgang allerdings nicht vernichtet und aus der Simulation entnommen. Vielmehr wird es mit einer neuen Wellenlänge sofort wieder reemittiert. Diese Methode wird im Abschnitt 4.2.3 bei der Betrachtung der Scheibenheizung im Detail vorgestellt. Nach jeder Interaktion, Streuung oder Absorption bzw. Reemission wird abermals eine neue Richtung und eine neue optische Tiefe bestimmt.

Jede Drehung des Photonenpakets, ausgedrückt durch die sphärischen Winkel ϕ und θ im Bezugssystem des Photons, wird durch eine Drehmatrix charakterisiert, die alle bisher durchgeführten Drehungen in umgekehrter Reihenfolge und in umgekehrtem Drehsinn enthält und damit zwischen Photonenraum und dem globalen Koordinatensystem (indiziert mit einem G) vermittelt. Es werden die Konventionen

der Arbeiten von [Bohren und Huffman \[1983\]](#) und [Fischer \[1992\]](#) beibehalten. Danach gilt für die Drehmatrix \mathbf{R} nach dem ersten Streuereignis, also einer einzelnen Drehung um die Winkel ϕ_1 und θ_1 :

$$\mathbf{R}^{1,G} = \begin{pmatrix} \cos(\phi_1) & -\sin(\phi_1)\cos(\theta_1) & -\sin(\phi_1)\sin(\theta_1) \\ \sin(\phi_1) & \cos(\phi_1)\cos(\theta_1) & \cos(\phi_1)\sin(\theta_1) \\ 0 & -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Diese Prozedur wird solange wiederholt, bis das Photon schlussendlich den Modellraum verlässt und gegebenenfalls von einem definierten Beobachter registriert werden kann. Welche Voraussetzungen gegeben sein müssen, damit ein austretendes Photon vom Beobachter empfangen werden kann, wird in Abschnitt [4.2.5](#) ausführlich diskutiert. Die Rücktransformation am Ort der letzten (k-ten) Interaktion in die Ausgangslage, also in das globale Bezugssystem, lässt sich als Hintereinanderausführung aller vorangegangenen Drehmatrizen beschreiben. Es gilt daher:

$$\mathbf{R}^{k,G} = \mathbf{R}^{1,G} \cdot \mathbf{R}^{2,1} \cdot \mathbf{R}^{3,2} \cdot \dots \cdot \mathbf{R}^{k,k-1}. \quad (4.8)$$

4.2.2 Streuung an kugelförmigen Staubkörnern und Polarisation

Mol3D verwendet den Stokes-Formalismus [[Stokes 1852](#)], um den Polarisationszustand der Strahlung zu beschreiben. In diesem Abschnitt wird dargestellt, wie sich der Stokes-Vektor $\vec{S} = (I, Q, U, V)^T$ eines Photons bei einem Streuereignis transformiert.

Den Ausführungen zu MC3D [[Wolf 2003a](#)] und *miex* [[Wolf und Voshchinnikov 2004](#)] folgend, wird zunächst die Richtung der gestreuten Streuung bestimmt. Mithilfe zweier Zufallszahlen werden dazu die sphärischen Winkel ϕ und θ im Bezugssystem des Photons berechnet. $\phi \in [0, 2\pi]$ bezeichnet den azimutalen Winkel senkrecht zur Ausbreitungsrichtung und $\theta \in [0, \pi]$ den Polarwinkel, wobei $\theta = 0$ Vorwärtsstreuung bzw. $\theta = \pi$ Rückwärtsstreuung entspricht. Die gesuchten Streuwinkel lassen sich aus der Phasenfunktion (entspricht M_{11} der Müller-Matrix) sowie dem Grad der linearen Polarisation der einfallenden Strahlung berechnen. Die Vorgehensweise ist detailliert in der Dissertation von [Fischer \[1992\]](#) dargestellt.

Sind die Winkel ϕ und θ bestimmt, so kann der Stokes-Vektor der Strahlung berechnet werden. Dazu muss zunächst der Stokes-Vektor der einfallenden Strahlung auf ein um den Winkel ϕ gedrehtes Bezugssystem ausgedrückt werden. Diese Drehung lässt sich folgendermaßen realisieren:

$$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\phi) & \sin(2\phi) & 0 \\ 0 & -\sin(2\phi) & \cos(2\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Dabei ist anzumerken, dass I , V , sowie $Q^2 + U^2$ gegenüber einer solchen Drehung invariant sind. Nach der Drehung um ϕ wird anschließend die Transformation um

den Winkel θ durchgeführt. Für den Stokes-Vektor \vec{S}' der gestreuten Strahlung gilt unter der Annahme kugelförmiger, homogener, isotroper Teilchen:

$$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}' \propto \begin{pmatrix} M_{11}(\theta) & M_{12}(\theta) & 0 & 0 \\ M_{12}(\theta) & M_{11}(\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_{33}(\theta) & M_{34}(\theta) \\ 0 & 0 & -M_{34}(\theta) & M_{33}(\theta) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Die einzelnen Komponenten der speziellen Müller-Matrix \mathbf{M} hängen unter dieser Vereinfachung nur von dem Streuwinkel θ ab und werden für eine vorgegebene Staubmischung aus den komplexen Streuamplituden berechnet, die wiederum aus den komplexen Brechungsindizes berechnet werden. In diesem konkreten Fall werden sie unter der Annahme von Mie-Streuung mithilfe von *miex* berechnet und in *Mol3D* eingelesen (vgl. Abschnitt 3.3).

Unpolarisierte Strahlung wird durch Einfachstreuung unter der Annahme sphärischer, homogener Teilchen nur linear polarisiert. Aus Gleichung 4.10 ergibt sich daher:

$$\begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}_1 = \mathbf{M} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} \\ M_{12} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Durch die Transformation in ein (globales) Bezugssystem, z. B. das des Modellraums oder des Beobachters (vgl. Abschnitt 4.2.5), muss der Stokes-Vektor nach Gleichung 4.9 transformiert werden. Aus diesem Grund ist es möglich, dass auch die U-Komponente des Stokes-Vektors Werte ungleich null annimmt. Für die V-Komponente, also den zirkular polarisierten Anteil der Strahlung, ist Mehrfachstreuung nötig. Der Polarisationsgrad P beschreibt, wie hoch der polarisierte Anteil an der Gesamtintensität der Strahlung ist. Aufgeteilt in einen linearen- und zirkularen-Anteil (P_L bzw. P_C) ergibt er sich jeweils zu:

$$P_L = \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I}, \quad P_C = \frac{V}{I} \quad P_{L,C} \in [0, 1]. \quad (4.12)$$

Damit berechnet sich der Polarisationsgrad der Einfachstreuung zu $P_L = -M_{12}/M_{11}$. Der zugehörige Winkel $\gamma \in [0, \pi]$ der linearen Polarisation, gemessen von der positiven y-Achse des gewählten Bezugssystems im Uhrzeigersinn, ergibt sich unter der hier verwendeten Definition zu:

$$\tan(2\gamma) = \frac{U}{Q}. \quad (4.13)$$

4.2.3 Heizung des Staubs

Wird ein Photon während des Zufallswegs absorbiert, so trägt es zu der Aufheizung des absorbierenden Materials bei. Dieser sehr intuitive Ansatz ist unter ande-

rem in der Arbeit von Bjorkman und Wood [2001] beschrieben und wird auch in MC3D verwendet. Insbesondere in Bereichen, die eine so hohe Dichte aufweisen, dass die Wahrscheinlichkeit für die Absorption eines Photons groß ist, ist diese Methode besonders effizient. Auf der anderen Seite darf das Material aber nicht so dicht sein, dass dort erst gar keine Photonen ankommen. Optisch dicke Bereiche wie die Mittelebene protoplanetarer Scheiben sind allerdings aufgrund der schlechten Photonenstatistik ein generelles Problem des Monte-Carlo-Strahlungstransports. Jüngst publizierte Ansätze, wie der modifizierte Zufallsweg (MRW³), der dafür sorgt, dass Photonen in Gebieten hoher optischer Tiefe nicht gefangen sind, oder die Photonendiffusions-Näherung (PDA⁴) lösen dieses Problem teilweise [siehe Min u. a. 2009; Robitaille 2010]. Da diese Methoden jedoch viele freie Parameter aufweisen, die allein aus Erfahrungswerten zu wählen sind, sind sie derzeit (noch) nicht in Mol3D implementiert.

Ist das betrachtete Staubmedium jedoch sehr dünn, so können die Photonen gar nicht erst absorbiert werden. In diesem Fall ist der von Bjorkman und Wood [2001] vorgeschlagene Algorithmus, aufgrund der wenigen absorbierten Photonen und der damit schlechten Statistik, sehr ineffektiv. Eine Methode, die dieses Problem sehr elegant löst, wurde von Lucy [1999a] vorgestellt und findet in Mol3D Anwendung. Dabei trägt das Photon nicht nur bei einer Absorption zur Temperaturerhöhung bei, sondern jeder Pfad, den ein Photon durch eine Zelle zurückgelegt hat. Es ergibt sich folgender Zusammenhang:

$$E_{\text{Zelle}} = \epsilon \sum C_{\text{abs},\lambda} l. \quad (4.14)$$

ϵ beschreibt die Energie des Photonenpakets, l die Weglänge und E_{Zelle} die interne Energie einer Zelle. Wie auch in vielen anderen Strahlungstransportprogrammen (vgl. Abschnitt 4.2.1) realisiert, tragen alle Photonen die gleiche Energieportion mit sich, die für den gesamten Zufallsweg konstant ist.

Nach jeder Absorption und sofortigen Emission muss die Wellenlänge des Photons aufgrund der erhöhten Energie in der Zelle, in der das Ereignis stattgefunden hat, neu angepasst werden. Mol3D verwendet dafür die von Bjorkman und Wood [2001] publizierte Methode, welche den Vorteil hat, dass keine Iterationen notwendig sind. Dabei wird die Temperatur automatisch während des Photonentransports angepasst und konvergiert mit jeder Absorption und Emission gegen den zu bestimmenden Endwert. Die neue Wellenlänge des Photons berechnet sich dabei aus dem Differenzspektrum der vorherigen und der neuen Temperatur in der Zelle. Im Allgemeinen ist diese Änderung der Temperatur gering. Dies wird in der Praxis durch die Wahl einer entsprechend hohen Anzahl an Photonen gewährleistet. Aus diesem Grund kann die neue Wellenlänge λ_0 durch eine Zufallszahl ξ unter Anwendung des fundamen-

³ engl.: Modified Random Walk

⁴ engl.: Photon Diffusion Approximation

talen Prinzips aus der nach der Temperatur abgeleiteten Kirchhoff-Planck-Funktion $dB_\lambda(T)$ ⁵ bestimmt werden. Es gilt:

$$\xi = \frac{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} C_{abs} dB_\lambda(T_{Zelle}) d\lambda}{\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} C_{abs} dB_\lambda(T_{Zelle}) d\lambda}. \quad (4.15)$$

Es sei erwähnt, dass *Mol3D* während des Photonentransports keine Staubtemperaturen explizit berechnet. Es wird lediglich die interne Energie in den einzelnen Zellen gespeichert. Dieser elegante und gleichzeitig effiziente Ansatz wurde von [Robitaille \[2011\]](#) vorgeschlagen und für *Mol3D* übernommen. Einzig im letzten Schritt nach dem Photonentransport wird die Staubtemperatur aus der internen Energie berechnet. Dazu wird wie folgt vorgegangen: Unter Annahme des lokalen thermischen Gleichgewichts (LTE) und der Bilanzierung der absorbierenden und emittierten Energie innerhalb einer Gitterzelle kann die Temperatur T einer vorgegebenen Staubkornzusammensetzung aus der internen Energie E_{Zelle} und dem Zellvolumen V_{Zelle} durch die folgende Gleichung berechnet werden:

$$\int_{\lambda_a}^{\lambda_b} C_{abs} B_\lambda(T) d\lambda = \frac{E_{Zelle}}{4\pi V_{Zelle}}. \quad (4.16)$$

Mol3D tabelliert die linke Seite der Gleichung vor der eigentlichen Berechnung. Nach Abschluss des Photonentransports wird die interne Energie der Zellen ausgewertet, die Tabelle durchsucht und zwischen den gefundenen diskreten Werten interpoliert. Alternativ kann Gleichung 4.16 auch unter der Verwendung iterativer Verfahren gelöst werden.

4.2.4 Die Behandlung des Gases

Molekül	Übergänge	
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	40	Mithilfe von <i>Mol3D</i> können die Besetzungszyahlen der Moleküle mit drei verschiedenen Methoden berechnet werden: LTE, FEP und LVG (vgl. Grundlagen 3.2). Wie in Abschnitt 5.4 noch gezeigt wird, wird im Kontext von protoplanetaren Scheiben dringend empfohlen die LVG-Methode zu verwenden (vgl. auch Abschnitt 3.2.2).
$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$	40	
$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$	40	
HCO^+	30	
CS	30	<i>Mol3D</i> ist speziell in Hinblick dafür entwickelt und optimiert wurden, Rotationsübergänge von Molekülen zu berechnen, die bereits in protoplanetaren Scheiben nachgewiesen wurden.
HCN	25	
HNC	25	

Tabelle 4.1 – Übersicht der in *Mol3D* verwendbaren Molekülsorten

Die einzelnen Linienübergänge werden durch die Drehimpulsquantenzahl J charakterisiert (siehe Abschnitt 3.2.1). Derzeit sind sieben Moleküspezies (Tab. 4.1) getestet und standardmäßig inkludiert. Alle Moleküleigenschaften wie beispielsweise die Übergangsfre-

⁵ kurz für: $\frac{\partial}{\partial T} B(T, \lambda)$

quenzen, die Einsteinkoeffizienten A_{ij} , die Anregungsenergien und die Kollisionsraten sind der Datenbank LAMDA⁶ [Schöier u. a. 2005] entnommen. Somit verwendet Mol3D dasselbe verbreitete Eingabeformat für die Moleküleigenschaften wie viele andere verfügbare Linien-Strahlungstransportprogramme, z. B. RADEX [van der Tak u. a. 2007] oder URAN(IA) [Pavlyuchenkov und Shustov 2004]. Diese Herangehensweise bietet den Vorteil, das Programm ohne großen Aufwand je nach Einsatzgebiet für verschiedene Moleküle, die in der LAMDA-Datenbank enthalten sind, zu erweitern. Diese umfasst zur Zeit⁷ drei Atom- und 32 Molekülarten.

Da die dominierenden Linien-Verbreiterungseffekte die Doppler-Verbreiterung aufgrund der thermischen Eigenbewegung der Gasteilchen und der turbulenten Geschwindigkeit sind, wird eine gauß-förmige Linienprofilfunktion $\Phi_{ij}(\nu)$ angenommen:

$$\Phi_{ij}(\nu) = \frac{c}{v_{\text{ges}} v_{ij} \sqrt{\pi}} \exp \left(-\frac{c^2 (\nu - \nu_{ij})^2}{v_{\text{ges}}^2 v_{ij}^2} \right), \quad (4.17)$$

wobei ν_{ij} die zentrale Frequenz des Linienübergangs vom oberen Niveau i zum unteren Niveau j darstellt und c die Lichtgeschwindigkeit beschreibt. Im Prinzip kann jedoch ebenso jede andere Profilfunktion (z. B. Voigt-Profil) eingebunden werden. Der Parameter v_{ges} bestimmt den gesamten Linienverbreiterungskoeffizienten, und ist wie folgt definiert:

$$v_{\text{ges}} = \sqrt{v_{\text{kin}}^2 + v_{\text{turb}}^2} = \sqrt{\frac{2k_B T_{\text{kin}}}{m_{\text{mol}}} + v_{\text{turb}}^2}, \quad (4.18)$$

dabei bezeichnet m die Teilchenmasse, v_{turb} die angenommene mikro-turbulente Geschwindigkeit und v_{kin} die thermische Geschwindigkeit, die der wahrscheinlichsten Geschwindigkeit der Gasteilchen bei gegebener kinetischer Temperatur T_{kin} entspricht und sich aus der kinetischen Energie der Teilchen ergibt. In Mol3D kann v_{turb} auf einen für protoplanetare Scheiben üblichen globalen Wert von $\sim 0.1 - 0.2$ km/s gesetzt werden [Piétu u. a. 2007; Hughes u. a. 2011]. Alternativ kann in jeder Gitterzelle das Ergebnis externer (M)HD/MRI-Simulationen angenommen werden.

Aufgrund der differentiellen Scheibenrotation ergibt sich ein weiterer, für die Beobachtungen von protoplanetaren Scheiben sowie deren Analyse wesentlicher Linienverbreiterungsmechanismus. Erscheint die Scheibe zum Beobachter geneigt, so bewirkt der projezierte Geschwindigkeitsanteil des Rotationsfelds eine Doppler-Verschiebung und damit eine Änderung der ursprünglich ausgesandten Wellenlänge λ_0 . Unter der Annahme eines stationären Beobachters und das v_{rad} die radiale Geschwindigkeit der Quelle relativ zum Beobachter bezeichnet, gilt für den nicht-relativistischen Doppler-Effekt [Unsold und Baschek 2002]:

$$\lambda = \lambda_0 \left(1 + \frac{v_{\text{rad}}}{c} \right), \quad \text{oder in Frequenzschreibweise: } \nu = \nu_0 \left(1 - \frac{v_{\text{rad}}}{c} \right). \quad (4.19)$$

⁶ Leiden Atomic and Molecular Database <http://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/>

⁷ Oktober 2015

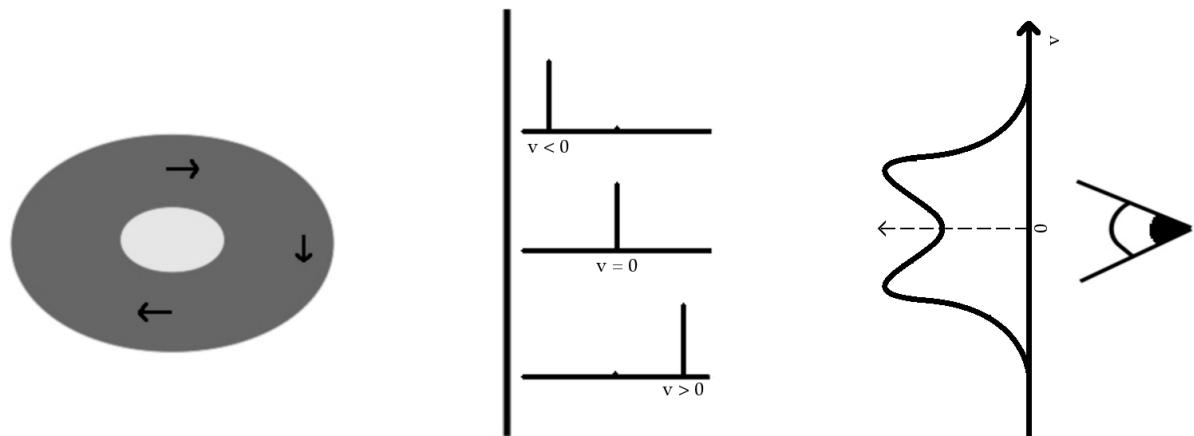


Abbildung 4.1 – Schematische Darstellung der Linienvorschubung aufgrund des Doppler-Effekts einer rotierenden Scheibe. Projezierte Geschwindigkeitsbeiträge in Richtung des Beobachters bewirken eine Blauverschiebung, vom Beobachter weg eine Rotverschiebung der Linie. Ohne Geschwindigkeitskomponente ($v = 0$) ist die Linie nicht verschoben. Durch die Rotation der Scheibe ergibt sich typischerweise ein Spektrum mit zwei Maxima (rechts).

In Abbildung 4.1 ist dies schematisch dargestellt. Bereiche der Scheibe, die sich auf den Beobachter zu bewegen, bewirken eine Blauverschiebung $v_{\text{rad}} < 0$ der Linie. Analog bewirken Bereiche, die sich von dem Beobachter weg bewegen, eine Rotverschiebung ($v_{\text{rad}} > 0$) hin zu längeren Wellenlängen. Aufgrund der unterschiedlichen Beiträge der projizierten Geschwindigkeiten ergibt sich nicht nur eine diskrete Verschiebung der Linie, sondern es ergibt sich das typische Linienspektrum mit zwei ausgeprägten Maxima (Abb. 4.1 rechts), wie es in vielen Studien anhand von Beobachtungen berichtet wurde [z. B. Casassus u. a. 2013a; Bruderer u. a. 2014].

An dieser Stelle sei angemerkt, dass es sich eingebürgert hat, Linienspektren nicht über der Frequenz oder der Wellenlänge darzustellen, sondern durch Gleichung 4.19 über der Geschwindigkeit. Dies ermöglicht den einfachen Vergleich unterschiedlicher Linienübergänge.

Um schlussendlich die Linienemission und -absorption berechnen zu können, wird die Kenntnis über die Gastemperatur benötigt. Die Abhängigkeit ist in den statistischen Gleichgewichtsgleichungen 3.15 durch die Temperaturabhängigkeit der Kollisionsraten $C_{i,j}$ begründet und hat somit direkten Einfluss auf die Besetzungszahlen. Zum anderen ist die Gastemperatur durch die Druckverbreiterung (siehe Gleichung 4.18) für die Form der Linien (Linienverbreiterung) verantwortlich. *Mol3D* nimmt daher standardmäßig die zuvor konsistent berechnete Staubtemperatur als Gasttemperatur an. Diese Approximation ist für optisch dicke Umgebungen, wie sie in den innersten Bereichen protoplanetarer Scheiben vorherrschen, gerechtfertigt. Sie scheitert aber im Fall für optisch dünne Bereiche, wie den obersten Scheibenschichten. Aus diesem Grund ist das Programm darauf ausgelegt, eine Gasttemperatur zu verwenden, die z. B. durch externe Programme aus der chemischen Zusammensetzung der Scheibe berechnet wurde [Semenov und Wiebe 2011].

Auch eine analytische Beschreibung der Gastemperatur, die von der Staubtempera-

tur, der Gasdichte oder der Moleküldichte abhängt, ist denkbar. Daher sind die entsprechenden Routinen in *Mol3D* derart generalisiert, dass solch ein Fall ohne großen Aufwand realisiert werden kann.

4.2.5 Numerische Detektion des Photons

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie die Photonen numerisch von einem virtuellen Beobachter empfangen werden können und damit eine räumlich aufgelöste Intensitätskarte oder eine SED erzeugt werden kann.

Dabei wird grundsätzlich zwischen zwei Methoden unterschieden, die jeweils in den entsprechenden Simulationsteilen verwendet werden können. Zum einen kann die Monte-Carlo-Methode verwendet werden und das Photon, welches nach dem Zufallsweg den Modellraum verlässt, direkt beobachtet werden. Hierbei kann entweder die Wellenlänge des Photons festgehalten (monochromatischer Strahlungstransport) oder per Zufallszahl eine Wellenlänge anhand des Spektrums der Strahlungsquelle gezogen werden (siehe Abschnitt 4.2.1).

Die erste Vorgehensweise erfordert, dass die Energie des Photonenpakets mit der Wahrscheinlichkeit gewichtet werden muss, mit der es von der Strahlungsquelle oder den Strahlungsquellen emittiert wird. Der Vorteil liegt darin, dass die Intensität bei exakt der gewählten Wellenlänge berechnet wird. Wird jedoch eine Wellenlänge per Zufallszahl bestimmt, so kann auf die Gewichtung der Photonenenergie verzichtet werden, da die Energie konstant in Abhängigkeit der Leuchtkraft der definierten Quelle(n) gesetzt wird (vgl. hierzu Formel 4.2). Bei beiden Methoden treffen die Photonen auf den Pixel des Detektors, der die Position des Photons am Ort der letzten Interaktion mit dem Medium repräsentiert.

Ist die Staubtemperatur bekannt (analytisch vorgegeben oder zuvor mithilfe der Monte-Carlo-Methode berechnet), so kann die Reemissionsstrahlung der Scheibe auch durch einen Strahlenverfolgungsalgorithmus⁸ berechnet werden. Dieser Ansatz erlaubt es, eine nahezu rauschfreie Reemissionskarte zu erzeugen, ist aber aufgrund der Natur des Algorithmus nicht in der Lage die Polarisation der Strahlung zu reproduzieren. Die Stokes-Komponenten Q, U und V sind daher alle null. Dieser Ansatz wird auch für die Berechnung Emission und Absorption der Moleküllinien verwendet.

Der Beobachter

Im Folgenden wird unter dem Begriff des Beobachters diejenige Richtung verstanden, aus welcher der Modellraum betrachtet wird. Der Beobachter wird durch seine Position relativ zum globalen Koordinatensystem des Modellraums sowie einem virtuellen Detektor mit einer definierten Anzahl an Pixeln, der den Modellraum abbildet, charakterisiert. Der Ort des Beobachters wird in *Mol3D* durch den Azimuthalwinkel ϕ_B , sowie den Polarwinkel θ_B beschrieben, der mit der Inklination der Scheibe identifizierbar ist (vergleiche Abbildung 4.2). Zwischen dem globalen Koordinatensystem

⁸ engl.: raytracer

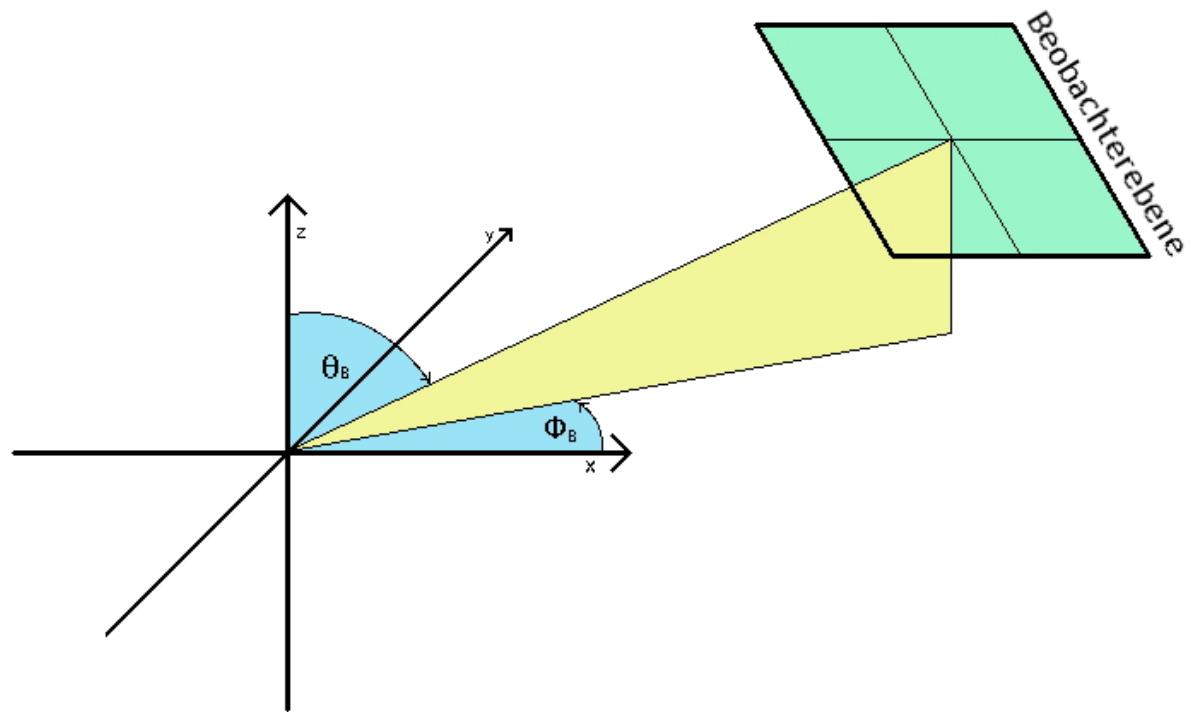


Abbildung 4.2 – Darstellung des Zusammenhangs zwischen dem globalen Koordinatensystem und dem des Beobachters.

des Modellraums (indiziert mit einem G) und dem Bezugssystem des Beobachters (indiziert mit einem B) vermittelt die folgende Rotationsmatrix $\mathbf{R}^{G,B}$:

$$\mathbf{R}^{G,B} = \begin{pmatrix} \sin(\phi_B) & \cos(\theta_B) & 0 \\ -\cos(\phi_B) \cos(\theta_B) & -\sin(\phi_B) \cos(\theta_B) & \sin(\theta_B) \\ \cos(\phi_B) \sin(\theta_B) & \sin(\phi_B) \sin(\theta_B) & \cos(\theta_B) \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Diese Definition, welche aus Kompabilitäts- und historischen Gründen derjenigen aus MC₃D entspricht, ordnet für die Wahl $\phi_B = 0^\circ$ und $\theta_B = 0^\circ$ die positive x-Achse des globalen Bezugssystems der negativen y-Achse im Bezugssystem des Beobachters und die positive y-Achse der positiven x-Achse zu. Die z-Achsen beider Koordinatensysteme sind identisch. Der Modellraum erscheint daher auf den ersten Blick um 90° verdreht.

Wie in Abschnitt 3.1 eingeführt, rechnet Mol₃D intern grundsätzlich mit Intensitäten in der Einheit $\frac{W}{m^2 \text{Hz sr}}$. Der Fluss, also die Energie pro Zeiteinheit pro Frequenzintervall und pro Einheitsfläche senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Strahlung, berechnet sich dann zu $F_\nu = \pi I_\nu$. Im Anschluss an die eigentliche Berechnung wird das Ergebnis der Flussdichte am Ort des definierten Beobachters in der Einheit Jansky⁹ pro Pixel berechnet.

Da die Flussdichte in erster Näherung nur vom Abstand des Beobachters abhängt,

⁹ 1 Jy = $10^{-26} \frac{W}{\text{Hz} \cdot \text{m}^2}$

ist es möglich, die korrekte Flussdichte im Nachhinein für verschiedene Objektentfernung zu berechnen. Mithilfe der beigefügten Visualisierungsprogramme ist dies effektiv mit nur einem Aufruf realisierbar. Da die Größe eines Pixels bekannt ist, gilt dies gleichermaßen für die Umrechnung der Flussdichte in die Einheit Jansky pro Quadratbogensekunde. Diese häufig in der Praxis angegebene Einheit ist unabhängig von der willkürlich festgelegten Größe der Pixel und bietet sich daher zum direkten Vergleich an.

Im Fall von Spektrallinien ist es in der Radioastronomie üblich, die Intensität in Einheiten der Helligkeitstemperatur T_B ¹⁰ auszudrücken. Sie ergibt sich mit der Rayleigh-Jeans-Näherung ($h\nu \ll kT$) zu:

$$T_B = \frac{I_\nu c^2}{2k\nu^2}. \quad (4.21)$$

Auch diese Größe ist unabhängig von der eigentlichen Pixelgröße und eignet sich daher ebenfalls sehr gut, um die Ergebnisse verschiedener theoretischer Studien sowie die Beobachtungen direkt miteinander zu vergleichen.

Beobachtung des Photons nach dem Zufallsweg

Die einfachste Möglichkeit räumlich aufgelöste Flusskarten und SEDs zu erzeugen ist, die Photonen nach ihrem Zufallsweg durch den Modellraum an vordefinierten Beobachtungsebenen zu registrieren. In *Mol3D* wird dies beispielsweise parallel zur Berechnung der Staubtemperatur durchgeführt.

Verlässt ein Photon den Modellraum, so wird überprüft, ob es sich in Beobachtungslage, d. h. in Richtung zum vordefinierten Beobachter, befindet. Unter der Annahme eines einzelnen Beobachters ist es allerdings numerisch (und statistisch, siehe auch Abschnitt 4.2.5) nicht möglich, dass ein austretendes Photonenpaket den Modellraum in (numerisch) exakt der Richtung zum Beobachter verlässt. Aus diesem Grund wird ein Raumwinkel ω , der sogenannte Akzeptanzwinkel, vorgegeben. Er gibt an, wie weit die Richtung des Photonenpaketes am Ort der letzten Interaktion von der Beobachtungsrichtung abweichen darf, damit das Photon dennoch auf den Detektor des Beobachters auftrifft. Je größer dieser Winkel gewählt wird, desto mehr Photonen kommen auf dem virtuellen Detektor des Beobachters an. Dies führt auf der einen Seite zu einer verbesserten Photonenstatistik. Auf der anderen Seite führt ein hoher Akzeptanzwinkel dazu, dass der simulierte Fluss von dem realistisch zu erwartenden Fluss abweicht. Ist beispielsweise die Scheibe derart zum Beobachter geneigt, dass der Stern vom aufgeweiteten Profil der Scheibe verdeckt wird, so kann ein zu groß gewählter Akzeptanzwinkel dazu führen, dass die direkte Sternstrahlung trotzdem den Beobachter erreicht.

Verlässt ein Photon nach seiner letzten (k-ten) Interaktion den Modellraum und wird seine Richtung als akzeptabel eingestuft, so ist die Bewegungsrichtung des Photons entlang der positiven z-Achse im Photonenraum in guter Näherung mit der Richtung zum Beobachter identifizierbar. Allerdings kann aufgrund des Zufallswegs die

¹⁰ engl.: Brightness temperature

xy-Ebene des Photonenraums gegenüber dem festen Bezugssystem des Beobachters um einen Winkel ϕ verdreht sein. Daher muss der Stokes-Vektor, bzw. der lineare Polarisationsgrad der Strahlung, um diesen Winkel korrigiert werden. Dies geschieht durch die Anwendung von Gleichung 4.9. Der gesuchte Winkel lässt sich mithilfe der folgenden Matrix-Gleichung bestimmen:

$$\mathbf{R}^{k,B} = \mathbf{R}^{G,B} \cdot \mathbf{R}^{k,G} = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Es sei angemerkt, dass diese Gleichung nur eine Näherung darstellt und die Güte der Näherung wie oben beschrieben von der Wahl des Akzeptanzwinkels abhängt. Je größer der Akzeptanzwinkel, desto größer ist folglich auch der Fehler der linearen Polarisation.

Zum Schluss wird die Intensität in dem zugeordneten Pixel (und dem zugehörigen Wellenlängen-Kanal) des virtuellen Detektors um die Intensität des eintreffenden Photonenpakets erhöht.

Peel-off Technik

Bei den in dieser Arbeit diskutierten astrophysikalischen Anwendungen befindet sich der Beobachter meistens sehr weit vom Objekt entfernt. Daher müssen die Photonen den Modellraum in einem sehr kleinen Raumwinkelbereich verlassen, um vom Beobachter empfangen werden zu können. Entsprechend unzulänglich ist daher die Statistik der ankommenden Photonen. Zudem ist diese Methode extrem ineffizient, da die Mehrzahl der Photonen nicht den Modellraum in Richtung des Beobachters verlässt und damit gar keinen Beitrag liefert. Dieses Problem lässt sich durch die Annahme einer rotationssymmetrischen Staubverteilung zum Teil umgehen. Dadurch kann das dreidimensionale Problem auf ein zweidimensionales Problem reduziert werden, was schlussendlich bei gleicher Anzahl an verwendeten Photonen zu einer besseren Photonenstatistik führt.

Auch wenn protoplanetare Scheiben in vielen vorangegangenen Studien aufgrund der technischen Limitierungen überwiegend als rotationssymmetrisch angenommen wurden, zeigen Simulationen, dass die Dichteverteilung im Allgemeinen jedoch azimutale Strukturen wie von innen nach außen laufende Spiralarme aufweist. An dieser Stelle sei auf die Modelle im dritten Teil (Kapitel 6 und 7) dieser Arbeit verwiesen. Dies wird durch zahlreiche aktuelle Beobachtungen bestätigt. So konnten beispielsweise [Brunngräber u. a. \[2015\]](#) durch die Auswertung von *MIDI*-Visibilitäten zu verschiedenen Epochen indirekt auf azimutale Strukturen schließen.

Aus diesem Grund wurde eine Vielzahl an Methoden entwickelt, die eine Verbesserung des Signal-zu-Rausch-Verhältnis versprechen. Alle diese Methoden vereinfachen einen bestimmten Aspekt des Strahlungstransports und führen daher zu einem genäherten Ergebnis. Eine sehr prominente und oft genutzte Methode wurde von [Yusef-Zadeh u. a. \[1984\]](#) eingeführt. Die sogenannte *peel-off*-Methode geht so vor,

dass nach jeder Interaktion des Photonenpaket ein zusätzliches Photon in die Richtung des Beobachters ausgesandt wird. Um die Energieerhaltung zu gewährleisten muss die Energie des neuen Photonenpaket folgendermaßen gewichtet werden:

$$\epsilon_{\text{gewichtet}} = \epsilon \cdot p_{\text{streu}} \cdot \exp(-\tau), \quad (4.23)$$

wobei ϵ die Energie des ursprünglichen Photons und p_{streu} die Wahrscheinlichkeit ist, mit welcher das zusätzliche Photon in die Richtung des Beobachters gestreut wird. Sie ergibt sich aus der Phasenfunktion (siehe Abschnitt 4.2.2) des Staubs für die entsprechenden Streuwinkel unter dem der Beobachter erscheint. τ beschreibt die optische Tiefe, die dem Photon auf seinem Weg durch den Modellraum zum Beobachter widerfährt. Da jedes Photon also mehrmals zu den Flusskarten und Energieverteilungen beiträgt, ergibt sich ein sehr viel besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis, als wenn lediglich die ankommenden Photonen ausgewertet werden.

Strahlenverfolgung

Die mit Abstand effizienteste Methode rauscharme Flusskarten und SEDs zu erzeugen, erfolgt mithilfe eines Strahlenverfolgungsalgorithmus. Diese Methode sendet, wie der Name schon sagt, parallele Strahlen durch den Modellraum und löst die Strahlungstransportgleichung (Gleichung 3.1) entlang des Wegs. Dabei liegt der Startpunkt hinter dem Modellraum und die Anfangsintensität des Strahls wird auf null oder den Wert einer Hintergrundstrahlung gesetzt. Die Generierung der Strahlen und das Durchlaufen durch den Modellraum kann auf verschiedene Arten realisiert werden.

Eine Möglichkeit, die auch von MC3D verwendet wird, ist die Festlegung der Anzahl der Strahlen anhand des Aufbaus des Modellraums. Erst nachdem sie den Modellraum durchquert haben, wird der zugehörige Pixel in dem virtuellen Detektor des Beobachters bestimmt und die berechnete Intensität dem Pixel hinzugefügt. Da diese Methode die Anzahl der Pixel bei der Generierung der Strahlen nicht betrachtet, kann es zu Bildartefakten kommen. Aus diesem Grund wird für Mol3D eine andere Vorgehensweise gewählt.

Es wird zunächst für jeden Pixelmittelpunkt genau ein Strahl erzeugt. Da ein Pixel jedoch eine gewisse Fläche des Modellraums abdeckt, ist es unter Umständen nicht ausreichend, dem Pixel nur den resultierenden Wert eines einzelnen Strahls zuzuordnen. Um dieses Problem zu lösen und damit die Energieerhaltung zu gewährleisten, vergleicht Mol3D beim Durchlaufen des Strahls durch den Modellraum die projizierte Fläche der aktuellen Zelle mit der Fläche des Pixels. Wird festgestellt, dass der Pixel um ein vorgegebenes Vielfaches (ein Faktor vier bis zehn hat sich bewährt) seiner Fläche größer als die aktuelle projizierte Zellenfläche ist, so wird dieser Pixel durch einen rekursiven Algorithmus in vier Teile geteilt. Es werden vier neue Strahlen erzeugt und deren Intensität bestimmt. Zum Schluss werden die berechneten Intensitäten der einzelnen Subpixel in den ursprünglichen Pixel zusammengeführt und gemittelt.

Für die Intensitäts-Integration entlang eines einzelnen Strahls ist ein eingebetteter

Runge-Kutta-Fehlberg-Löser der vierten und fünften Ordnung [Fehlberg 1970] mit automatischer Schrittweitenkontrolle [Algorithmus 16.21, Engeln-Müllges u. a. 2011] implementiert. Dies hat den entscheidenden Vorteil, dass nur der relative und absolute Fehler vorgegeben werden müssen und die Schrittweite je nach Modelleigenschaften automatisch gewählt wird. Dies kann die Laufzeit nachteilig beeinflussen, allerdings kann sich der Anwender sicher sein, dass die berechneten Intensitäten immer innerhalb des vorgegebenen Fehlers liegen¹¹.

Der Strahlenverfolgungsalgorithmus ist die bevorzugte Wahl, um rauscharme Karten und SEDs der thermischen Reemission zu berechnen. Auch wird er verwendet, um räumlich aufgelöste Moleküllinienkarten zu erzeugen. Dabei werden grundsätzlich dieselben Routinen wie im Kontinuumfall verwendet. Allerdings unterscheidet sich die zu lösende Differentialgleichung um die Absorptions- und Emissionseigenschaften der betrachteten Moleküle (siehe Gleichung 3.1). Aufgrund der Abhängigkeit von dem umgebenden Geschwindigkeitsfeld sind die Emissions- und Absorptionskoeffizienten des Gases innerhalb einer Zelle nicht konstant, was die Lösung der Differentialgleichung im Gegensatz zum Kontinuumfall erheblich erschwert. Ist die Schrittweite z. B. zu groß gewählt, so kann es passieren, dass die zugehörige Geschwindigkeitsänderung so groß ist, dass die Linie übersprungen wird. Dies wird im Englischen auch als *doppler jump* bezeichnet. Um dieses Problem effektiv zu umgehen, existieren verschiedene Verfahren [siehe unter anderem Pontoppidan u. a. 2009], die die auftretenden Geschwindigkeitsgradienten betrachten und dadurch ein Überspringen der Linie verhindern. Für Mol3D wurde entschieden einen etwas komplexeren Ansatz zu wählen und den bereits erwähnten Runge-Kutta-Fehlberg-Löser zu implementieren und zu verwenden. Dieser löst das Problem automatisch und bietet zusätzlich die oben genannten Vorteile.

Der vorgestellte Strahlenverfolgungsalgorithmus kann nicht verwendet werden um Streukarten zu erzeugen. Dies würde die Information über die Richtungs- und Frequenzabhängigkeit der gestreuten Strahlung in jeder Zelle des Modellraums benötigen. Wie in der Arbeit von Pinte u. a. [2009] ausführlich diskutiert wird, hat dies einen für derzeitige Computersysteme extrem hohen Arbeitsspeicherbedarf zur Folge, oder aber die Lösung ist bei entsprechenden Vereinfachungen der Streuphasenfunktionen nicht besonders akkurat. Aus diesem Grund wurde bisher auf die Implementierung eines solchen Algorithmus verzichtet.

Schlussendlich soll noch vermerkt werden, dass daher unter Verwendung des Strahlenverfolgungsalgorithmus der Polarisationszustand aufgrund der Natur des Verfahrens nicht reproduzierbar ist. Die Komponenten U, Q und V des Stokes-Vektors sind in diesem Fall immer null.

¹¹ Anmerkung: Standardmäßig sind die Fehlerschranken in Mol3D zu $1 \cdot 10^{-8}$ sowie $1 \cdot 10^{-30}$ gesetzt.

5

BENCHMARKS UND TESTS

In diesem Kapitel wird die korrekte Funktionsweise von Mol₃D nachgewiesen. Zu diesem Zweck werden sowohl einfache als auch komplexe Testfälle aufgesetzt. Die Ergebnisse werden mit analytischen Lösungen (soweit diese existieren) sowie mit den Ergebnissen von ausführlich getesteten Strahlungstransportprogrammen verglichen. Die ausgewählten Testfälle stellen sehr wichtige Meilensteine in der Entwicklungsphase des neuen Programms dar, da sie die korrekte Umsetzung und Funktionsweise von Mol₃D demonstrieren. Das Bestehen dieser Tests ist Voraussetzung, um Mol₃D in den im dritten Teil dieser Arbeit dargestellten astrophysikalischen Studien verwenden zu können.

5.1 EINLEITUNG

Die Referenzergebnisse, mit denen die Ergebnisse von Mol₃D verglichen werden, werden für den Linien-Strahlungstransport mit URAN(IA) (siehe Abschnitt 3.4.3) und für den Kontinuum-Strahlungstransport mit MC₃D (Abschnitt 3.4.3) erzeugt. Da für den Linien-Strahlungstransport die korrekte Berechnung der Staubtemperatur und damit die korrekte Behandlung des Staubs Voraussetzung ist, wird zunächst der Kontinuum-Strahlungstransport und im Anschluss der Linien-Strahlungstransport getestet.

Alle hier diskutierten Testfälle haben gemein, dass immer eine protoplanetare Scheibe simuliert wird, deren Dichteverteilung, wenn nicht explizit anders angegeben, durch ein Shakura & Sunyaev-Profil (siehe Abschnitt 2.2) parametrisiert wird. Die einzelnen Stern- und Scheibeneigenschaften (z. B. Scheibenmasse, Innen- und Außenrand) sind in den entsprechenden Abschnitten beschrieben. Die Staubkorneigenschaften werden im Vorfeld nach der Mie-Theorie mit m_{ex} aus den komplexen Brechungsindizes berechnet. Wenn nicht explizit angegeben, wird typischer MRN-Staub verwendet, wie er in Abschnitt 3.3 beschrieben ist.

5.2 TEMPERATURBERECHNUNG DES STAUBS

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass Mol₃D im optisch dünnen sowie im optisch dicken Fall die Temperaturschichtung einer gegebenen Staubscheibe korrekt berechnet. Bei einem Staubkorn mit vorgegebenen Absorptions- und Emissionseigenschaf-

ten, welches von einer (oder mehreren) Strahlungsquelle(n) geheizt wird, stellt sich eine Gleichgewichtstemperatur ein. Diese ergibt sich aus dem Gleichgewicht der Einstrahlung über die Querschnittsfläche mit der Abstrahlung über die Staubkornoberfläche.

5.2.1 Optisch dünner Fall

Im optisch dünnen Fall, also unter der Annahme, dass das Staubkorn der direkten Sternstrahlung ausgesetzt ist, kann die Temperatur des Staubs semi-analytisch berechnet werden. Durch die Bilanzierung der Ein- und Abstrahlung des Staubs kann der Abstand R eines Staubkorns zur Strahlungsquelle bei einer gegebenen Staubkorn-Temperatur T_{Korn} wie folgt bestimmt werden [Backman und Paresce 1993; Wolf und Hillenbrand 2003]:

$$R(T_{\text{Korn}}) = \frac{R_{\text{Stern}}}{2} \left[\frac{\int_0^{\infty} C_{\text{abs}}(a, \lambda) B_{\lambda}(T_{\text{Stern}}) d\lambda}{\int_0^{\infty} C_{\text{abs}}(a, \lambda) B_{\lambda}(T_{\text{Korn}}) d\lambda} \right]^{1/2}. \quad (5.1)$$

Diese Formel kann, unter der Verwendung von diskreten Werten für den Absorptionsquerschnitt C_{abs} , nicht direkt nach der Staubkorn-Temperatur T_{Korn} aufgelöst werden. Sie muss daher mit einem geeigneten numerischen Verfahren, wie dem in diesem Fall verwendeten Newton-Verfahren, gelöst werden. Auch lässt sich aus Gleichung 5.1 direkt erkennen, dass die Temperatur des Staubkorns nur durch C_{abs} beeinflusst wird, der wiederum in Abhängigkeit von der Staubkorngröße steht. Aus dem Vergleich zwischen C_{abs} von kleinen und großen Staubpartikeln kann abgeleitet werden, dass kleinere Staubkörner besser in der Lage sind die direkte Sternstrahlung im Infraroten zu absorbieren als große Staubteilchen. Aufgrund des geringeren Absorptionsquerschnitts von kleinen Staubkörnern im Submillimeterbereich folgt damit, dass kleine Staubteilchen im Vergleich zu größeren Teilchen eine höhere Temperatur aufweisen.

Für den nun folgenden Vergleich wird ein Stern mit einer Temperatur von 4 000 K, sowie einem Radius von $2 R_{\odot}$ gewählt. Die Scheibenmasse wird auf einen geringen Wert von $M_{\text{Scheibe}} = 10^{-15} M_{\odot}$ gesetzt, um ein optisch dünnes Medium zu erzeugen. Die weiteren Scheibenparameter sind aufgrund der geringen Masse vernachlässigbar. Es ist nur von Relevanz, dass ein theoretisches Staubkorn, ohne Abschattung durch weitere Staubkörner, direkt vom Zentralstern geheizt werden kann. Eine optisch dünne, homogene, kugelsymmetrische Staubverteilung führt daher zu gleichwertigen Resultaten.

In Abbildung 5.1 ist die analytische, aus Gleichung 5.1 resultierende Temperatur sowie die von *Mol3D* berechnete Temperatur über dem Abstand vom Stern aufgetragen. Die Temperaturverteilung, die von *Mol3D* mithilfe der Monte-Carlo-Methode berechnet wurde, weicht für dieses Beispiel um weniger als 1% von der theoretisch zu erwartenden Temperatur ab. Sie liegt jedoch immer unterhalb der semi-analytischen Lösung. Dieser Trend lässt sich zum einen dadurch erklären, dass die Photonen ein festes Energiepaket tragen. Zum anderen wird aufgrund des verwendeten Verfahrens

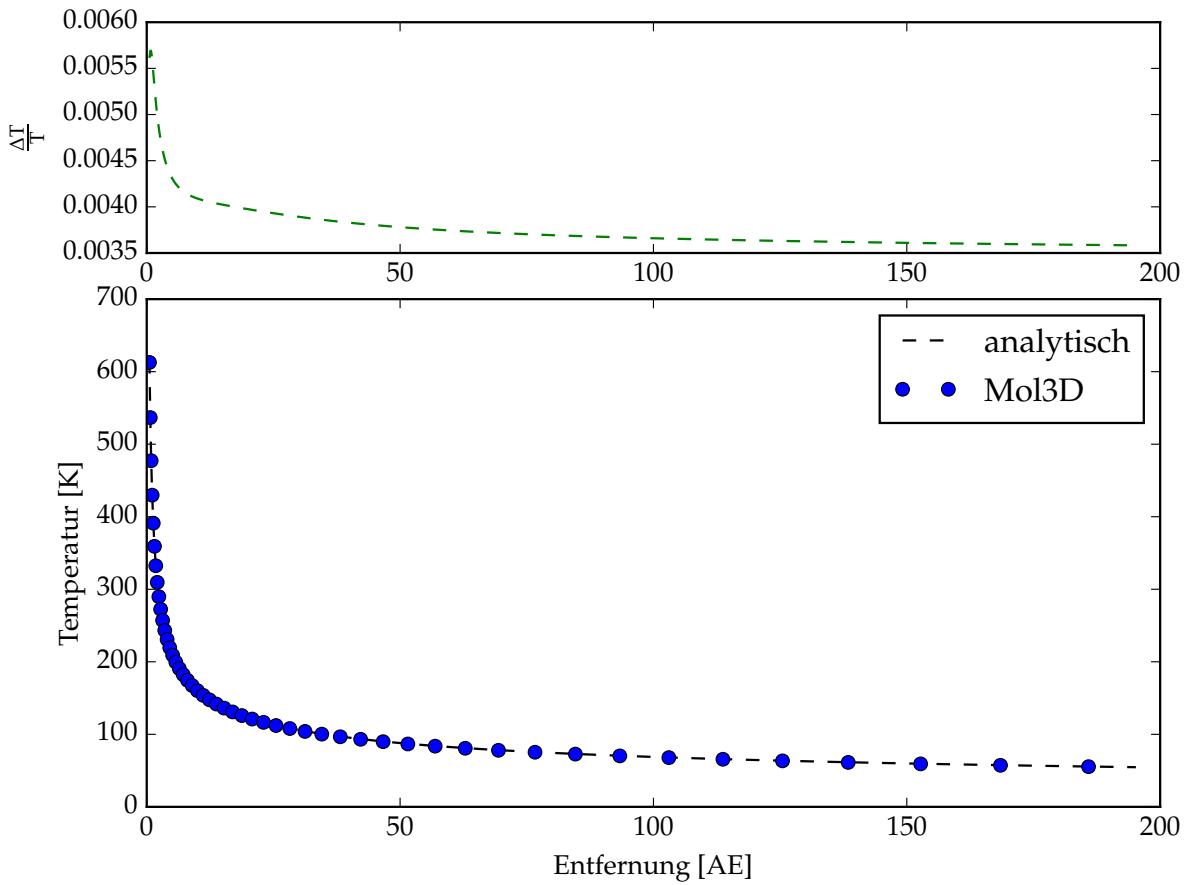


Abbildung 5.1 – Temperaturverlauf im optisch dünnen Fall. Dargestellt ist die mit *Mol3D* berechnete Lösung (blau) sowie die semi-analytische Lösung (schwarz, Gl. 5.1). Die Abweichungen (oben) betragen weniger als 1 %.

die Wellenlänge aus dem Sternspektrum gezogen. Es liegt also ein Diskretisierungsproblem vor. Eine Verbesserung kann daher insbesondere durch die Erhöhung der Anzahl der Wellenlängen, mit denen das Sternspektrum approximiert wird, erreicht werden.

5.2.2 Optisch dicker Fall

Protoplanetare Scheiben sind für die kurzwellige Sternstrahlung ($\lesssim 1 \mu\text{m}$) im Allgemeinen nicht transparent. Insbesondere die Scheibenmittelebene weist eine sehr hohe optische Tiefe auf. Sie kann daher nicht von der direkten Sternstrahlung durchdrungen und somit direkt geheizt werden. Diese Scheibenbereiche werden indirekt durch langwelligere Strahlung geheizt, die am Innenrand der Scheibe sowie an der Scheibenoberfläche emittiert oder gestreut wird.

Um zu zeigen, dass *Mol3D* die Temperatur in optisch dicken Staubkonfigurationen korrekt berechnet, wird die Temperatur der Mittelebene einer typischen protoplanetaren Scheibe mit einer Staubmasse von $4 \cdot 10^{-4} M_{\odot}$ berechnet. Da es für solch

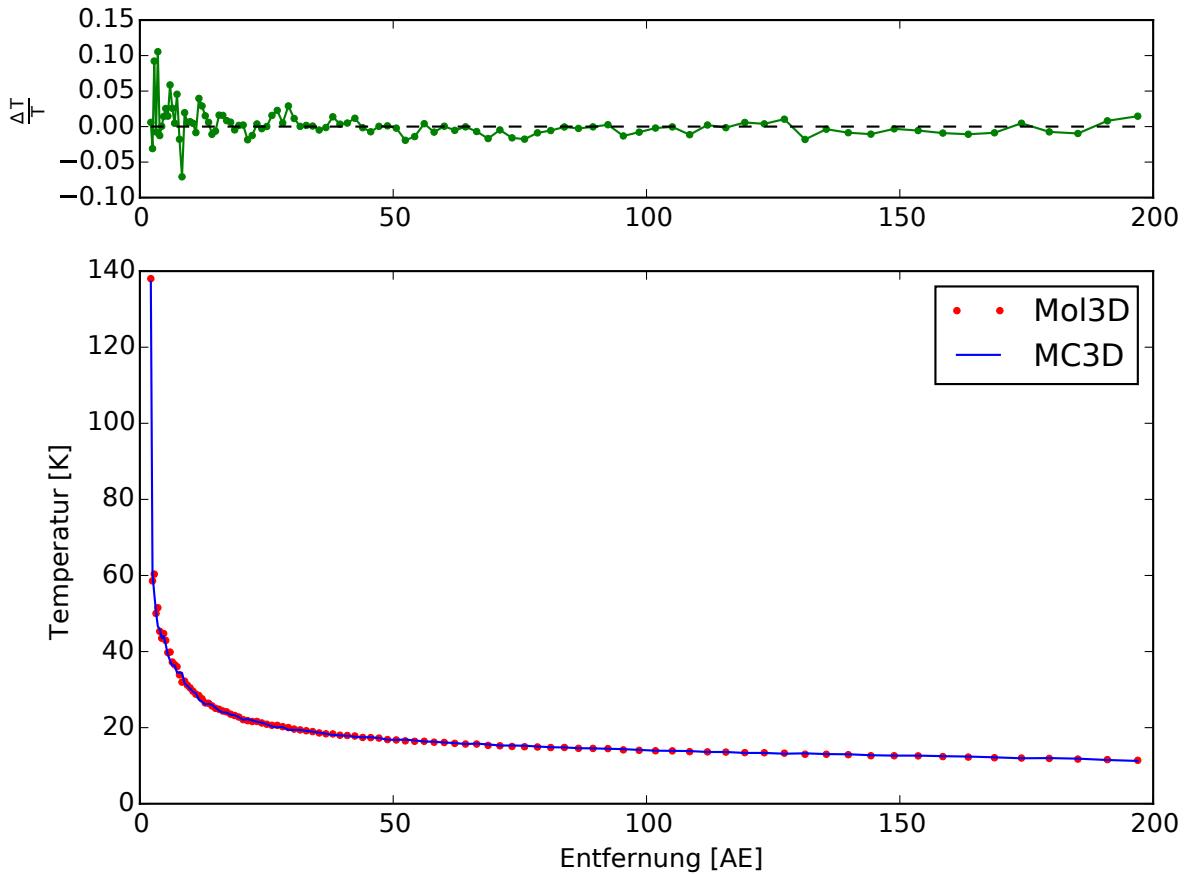


Abbildung 5.2 – Mittelebenen-Temperatur einer typischen protoplanetaren Scheibe um einen Vor-Hauptreihenstern (T Tauri). *Mol3D* (rot) sowie *MC3D* (blau) berechnen sehr vergleichbare Ergebnisse. Die Unterschiede der Ergebnisse der beiden Programme lassen sich auf die jeweils zugrunde liegenden Monte-Carlo-Methoden zurückführen. Die Abweichungen liegen in diesem Fall am Innenrand bei maximal 10% sowie am Außenrand der Scheibe bei maximal 2 %.

einen komplexen Fall keine einfache analytische Lösung gibt, mit der die Ergebnisse verglichen werden können, wird die resultierende Temperaturverteilung mit den Ergebnissen von *MC3D* verglichen. Die betrachtete Scheibe hat einen Innenrand von 2 AE und einen Außenrand von 200 AE. Die Dichteverteilung wird durch Gleichung 2.2 beschrieben. Die Temperatur der Staubscheibe wird mit den jeweiligen Monte-Carlo-Verfahren berechnet, die zwar unterschiedlich implementiert sind (siehe Abschnitt 4.2 für einen detaillierteren Vergleich), aber auf denselben theoretischen Modellen und Ansätzen, wie lokales thermisches Gleichgewicht und sofortige Temperatur- und Wellenlängen-Korrektur nach Bjorkman und Wood [2001], basieren.

Die resultierende Mittelebenen-Temperatur der Scheibe um einen typischen Vor-Hauptreihenstern (T Tauri) ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Beide Programme sind in der Lage eine sehr rauscharme Temperaturverteilung der Mittelebene zu berechnen. Die Lösung, die mit *MC3D* berechnet wurde, wird aufgrund der langjährigen Erfah-

rungen mit diesem Programm als Referenzwert angesehen. Die statistische Natur der Monte-Carlo-Simulation führt zu Abweichungen von maximal 10 % in den innersten sowie zu weniger als 2 % in den äußeren Regionen der Scheibe. Dieser Effekt liegt hauptsächlich in der Wahrscheinlichkeit, mit der ein Photonenpaket eine bestimmte Scheibenregion erreicht. Die Abweichungen können weiter vermindert werden, indem man die Anzahl der Photonenpakete erhöht. Dies hat konsequenterweise eine Erhöhung der Laufzeit zur Folge.

Schlussendlich lässt sich jedoch anhand der hier dargestellten Ergebnisse festhalten, dass *Mol3D* in der Lage ist, die Temperaturstruktur einer gegebenen komplexen Staubverteilung im Rahmen der numerischen und statistischen Genauigkeit im optisch dünnen und im optisch dicken Fall akkurat zu bestimmen. Damit ist die Grundvoraussetzung zur Berechnung der thermischen Reemissionsstrahlung gegeben. Auch wird dadurch bewiesen, dass das gesamte zugrunde liegende statistische Verfahren mit allen Komponenten, wie die Berechnung des Zufallswegs sowie die Wellenlängen- und Temperaturkorrektur, erwartungsgemäß funktioniert.

5.3 KONTINUUMSSTRAHLUNG

Bevor in Abschnitt 5.4 auf die Linienstrahlung eingegangen wird, wird in diesem Abschnitt die Behandlung der Kontinuumstrahlung von *Mol3D* getestet und qualitativ sowie quantitativ mit MC₃D verglichen. Dies umfasst den Vergleich von SEDs, räumlich aufgelösten Streulicht- und thermischen Reemissionskarten, sowie der Polarisation durch Streuung an den Staubkörnern. Um dabei zu gewährleisten, dass *Mol3D* nicht nur elementare Testfälle besteht, sondern auch komplexe Effekte korrekt reproduziert, werden die Ergebnisse ausgewählter Scheibenmodelle mit aktuell publizierten Studien qualitativ verglichen. Außerdem wird der Unterschied zwischen monochromatischem Strahlungstransport und dem mit einer finiten Wellenlängenkanalbreite diskutiert und die Vorteile der implementierten *peel-off*-Technik vorgestellt.

Für diesen Teil der Arbeit wird eine typische protoplanetare Scheibe um einen sonnenähnlichen Stern ($T = 6\,000\text{ K}$, $R = 1\text{ R}_\odot$, $L = 1.16\text{ L}_\odot$) betrachtet.

Die Dichteveerteilung wird wie zuvor durch ein Shakura & Sunyaev-Profil (siehe Abschnitt 2.2) beschrieben. Alle wichtigen Parameter der Scheibe sind in Tabelle 5.1 gelistet.

Zur späteren Vergleichbarkeit entsprechen die gewählten Parameter denjenigen aus der Studie von [Kirchschlager und Wolf 2014] und stellen gleichzeitig die Standard-

Parameter	Wert(e)
$T_{\text{Stern}} [\text{K}]$	6 000
$R_{\text{Stern}} [\text{R}_\odot]$	1
$L_{\text{Stern}} [\text{L}_\odot]$	1.16
$R_{\text{innen}} [\text{AE}]$	1
$R_{\text{außen}} [\text{AE}]$	100
$M_{\text{Staub}} [\text{M}_\odot]$	$10^{-4,-5}$
α	2.625
β	1.125
$h_0 [\text{AE}]$	10
$\rho_{\text{Staub}} [\text{g/cm}^3]$	3.5
$d [\text{pc}]$	140

Tabelle 5.1 – Verwendete Stern- und Scheibenparameter für die Vergleichsstudie zur Kontinuumstrahlung

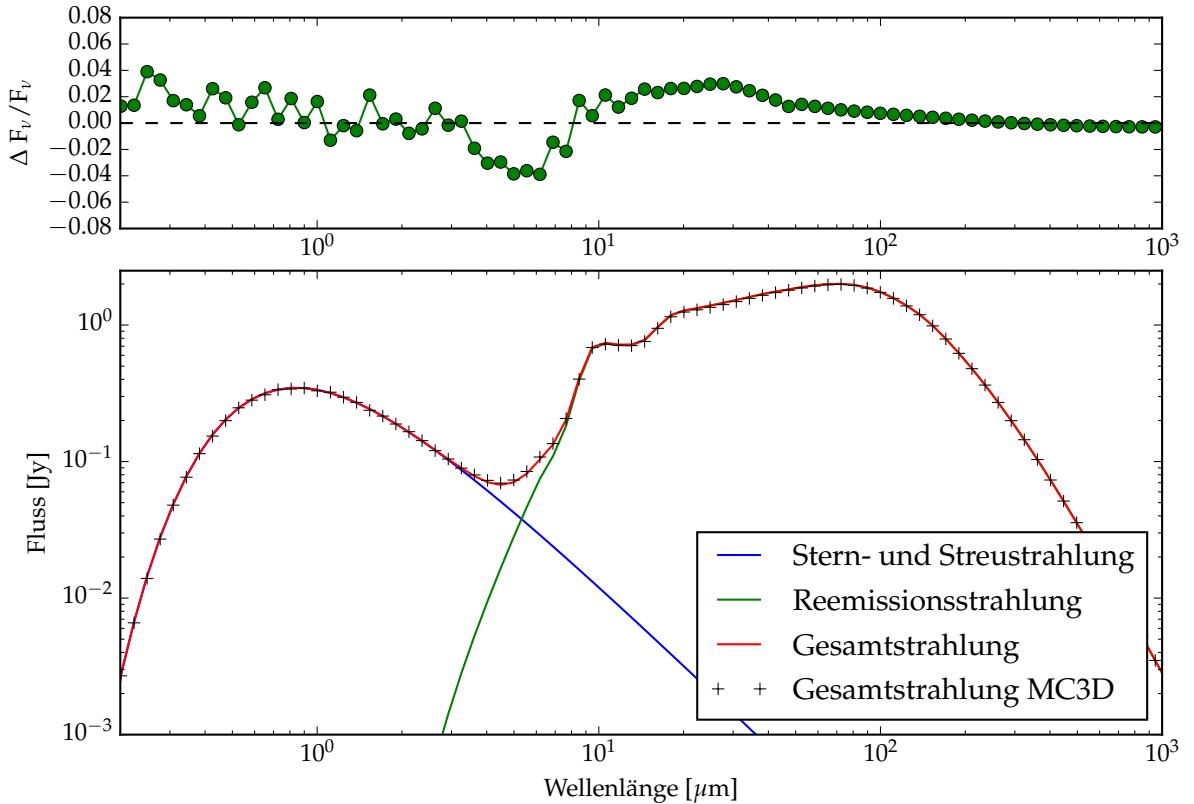


Abbildung 5.3 – Vergleich der spektralen Energieverteilungen berechnet von *Mol3D* (rot) und *MC3D* (schwarze Kreuze). Die Abweichungen betragen weniger als 5 %.

einstellung von *MC3D* für protoplanetare Scheiben dar.

5.3.1 Vergleich der spektralen Energieverteilung

Zunächst wird die spektrale Energieverteilung mit *Mol3D* und *MC3D* für eine protoplanetare Scheibe mit einer Staubmasse von $M_{\text{Staub}} = 10^{-5} M_\odot$ berechnet, die in Draufsicht mit einer geringen Inklination von $i = 1^\circ$ erscheint. Die Wahl der Inklination liegt in den numerischen Beschränkungen von *MC3D* begründet. *Mol3D* ist diesem Problem nicht unterworfen.

Das Ergebnis ist in Abbildung 5.3 dargestellt. Die Gesamtstrahlung setzt sich aus zwei Anteilen zusammen, die getrennt berechnet werden müssen. Zunächst wird mit dem Strahlenverfolgungsalgorithmus die thermische Reemissionsstrahlung der Scheibe berechnet (in grün dargestellt). Der zweite Beitrag (in Abbildung 5.3 blau dargestellt) setzt sich aus der direkten Strahlung des Sterns und der an der Scheibe gestreuten Strahlung zusammen. Dieser Anteil wird mit dem beschriebenen Monte-Carlo-Strahlungstransport berechnet. Die in *Mol3D* implementierte *Peel-off*-Technik wird zunächst nicht verwendet, da sie in *MC3D* nicht eingebaut ist und ihre korrekte Implementierung im Anschluss separat geprüft wird.

Der Vergleich zwischen beiden Programmen zeigt, dass sie sehr vergleichbare Ergebnisse produzieren. Die Abweichungen betragen weniger als 5 % (siehe Abbildung 5.3 oben). Sie sind für Wellenlängen unter $\sim 5 \mu\text{m}$ (Stern- und Streustrahlung) alleine durch den Zufallsweg der Photonen zu erklären. Für größere Wellenlängen wird die Gesamtstrahlung durch die thermische Reemissionsstrahlung der Scheibe dominiert. Die Unterschiede ergeben sich zum einen aufgrund der leicht unterschiedlichen Temperaturstruktur und zum anderen durch die unterschiedlichen verwendeten Ansätze bei der Strahlenverfolgung. Daher ist festzuhalten, dass *Mol3D* in der Lage ist, die spektrale Energieverteilung einer typischen protoplanetaren Scheibe im Rahmen der Genauigkeit der verwendeten Verfahren zu berechnen.

5.3.2 Vergleich der unterschiedlichen Berechnungsmethoden

Wie zuvor gezeigt, lässt sich die spektrale Energieverteilung durch eine Kombination des Stern- und Streulichts, sowie der thermischen Reemission berechnen. Allerdings wird dabei die Streuung der thermischen Reemission der Scheibe vernachlässigt. Auch muss zunächst die Staubtemperatur der Scheibe mithilfe der Monte-Carlo-Methode bestimmt werden, um im Anschluss die thermische Reemission der Scheibe berechnen zu können. Zusammengefasst sind also drei Schritte notwendig, um die gesamte spektrale Energieverteilung zu erhalten, welche die Streuung der thermischen Reemission nicht berücksichtigt.

Um diese Problematik zu umgehen, kann eine weitere Methode verwendet werden. Wie in Abschnitt 4.2.5 beschrieben, lassen sich die den Modellraum verlassenden Photonen bei der Berechnung der Scheibentemperatur beobachten. Die Wellenlänge dieser Photonen wurde zunächst per Zufallszahl aus dem vorgegebenen diskreten Quellspektrum ausgelost und danach durch die Temperaturkorrektur nach Bjorkman und Wood [2001] bei eventuell auftretenden Absorptionsereignissen angepasst. Da der Zufallsweg des Photons bis zum Verlassen des Modellraums verfolgt wird und das Photon damit potenziell bis zum Austreten mit der Scheibe interagieren kann, enthält die beim Beobachter eintreffende Strahlung sowohl die Stern- und Streustrahlung, die thermische Reemissionsstrahlung, sowie die wieder gestreute thermische Reemissionsstrahlung.

Das Ergebnis dieser auf den ersten Blick sehr effizient erscheinenden Methode ist in Abbildung 5.4 für das oben bereits vorgestellte Scheibenmodell illustriert. Dazu ist in blau die aus dem monochromatischen Strahlungstransport zusammengesetzte spektrale Energieverteilung und in grün die allein aus der Temperaturberechnung abgeleitete Energieverteilung dargestellt. Generell liefern beide Methoden sehr vergleichbare Ergebnisse, die maximal 30% voneinander abweichen. Dies lässt sich auf zwei Phänomene zurückführen.

Zum einen enthält die aus der Temperaturberechnung gewonnene spektrale Energieverteilung die gestreute Strahlung der thermischen Reemission. Dies erklärt den erhöhten Fluss im Bereich des Silikat-Merkmales ($\sim 10 \mu\text{m}$).

Zum anderen liegen den Berechnungen diskrete, logarithmisch aufgeteilte Wellenlängen zugrunde, an denen das Sternspektrum sowie die Staubeigenschaften definiert

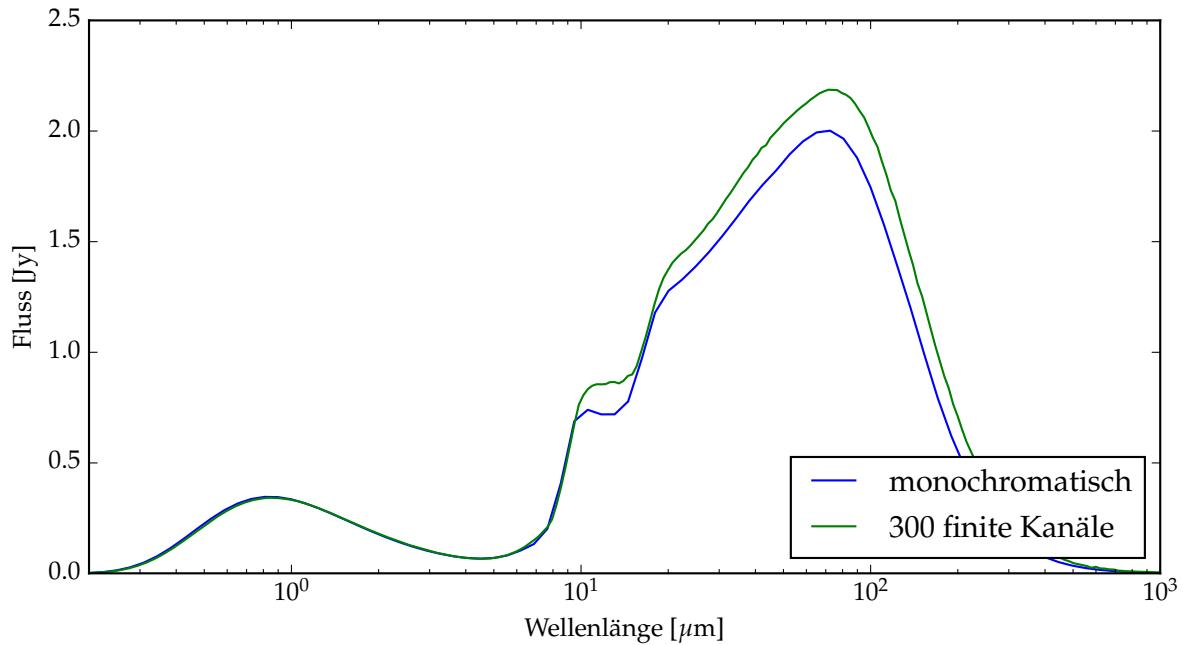


Abbildung 5.4 – Vergleich der spektralen Energieverteilungen berechnet mit monochromatischem Strahlungstransport (blau) und mit 300 Wellenlängenkanälen (grün), die durch das verwendete Monte-Carlo-Verfahren statistisch ausgelöst werden.

sind. Daher ist die Wahrscheinlichkeit, mit der eine diskrete Wellenlänge ausgelöst wird, mit der gesamten Breite dieses Wellenlängenkanals gewichtet. Dieses Problem lässt sich durch eine Erhöhung der Anzahl der Wellenlängen minimieren. Allerdings zieht diese Vorgehensweise nach sich, dass die Anzahl an Photonen entsprechend der Anzahl an Wellenlängen erhöht werden muss, um eine ausreichende Photonestatistik zu gewährleisten. Daher bietet sich die Kombination dieser Methode mit der *Peel-off*-Technik an, wodurch das Signal-zu-Rausch-Verhältnis signifikant verbessert wird.

5.3.3 Vergleich der räumlich aufgelösten Flusskarten

Abschließend zum Vergleich der Kontinuumssstrahlung werden die mit *Mol3D* berechneten räumlich aufgelösten Flusskarten mit denen von *MC3D* verglichen. Die Streukarten werden sowohl mit eingeschalteter als auch mit deaktivierter *Peel-off*-Technik berechnet, um gleichzeitig die korrekte Funktionsweise dieser Technik zu verifizieren. Es wird dasselbe Scheibenmodell wie zuvor verwendet, allerdings mit einer höheren Staubmasse $M_{\text{Staub}} = 10^{-4} M_{\odot}$, um die Vergleichbarkeit mit der Arbeit von [Kirchschlager und Wolf \[2014\]](#) zu gewährleisten.

Zunächst wird wieder angenommen, dass die Scheibe in (nahezu) Draufsicht ($i = 1^\circ$) erscheint. Da sich die drei Berechnungsmethoden unterscheiden, wird die Anzahl der Photonen so gewählt, dass alle Methoden in etwa die gleiche Laufzeit (~ 14 Stunden) benötigen. So lässt sich eine praxistaugliche Aussage darüber ableiten, welche

Methode bzw. welches Programm effizienter arbeitet. Es ergibt sich, dass für MC₃D zwei Milliarden Photonen, für Mol₃D mit deaktivierter *Peel-off*-Technik 2.7 Milliarden und für Mol₃D mit *Peel-off*-Technik 0.4 Milliarden Photonen verwendet werden.

In Abbildung 5.5 sind die resultierenden Stokes-Vektoren für eine Wellenlänge von 0.4 μm für die drei Simulationen dargestellt. Es zeigt sich, dass alle drei Verfahren qualitativ vergleichbare Ergebnisse produzieren. Die einzelnen Komponenten der Stokes-Vektoren unterscheiden sich nur durch die Anzahl und Position der Photonen, die auf dem virtuellen Detektor des Beobachters angekommen sind. Zudem zeigen die Q- und U-Vektoren aller Methoden dasselbe, für Einfachstreuung charakteristische Muster. Daraus folgt, dass auch der Grad der linearen Polarisation I_P (siehe Gleichung 4.12), sowie der Polarisationswinkel (Gleichung 4.13) qualitativ übereinstimmen (siehe dazu auch die obere Reihe in Abbildung 5.7).

Für die Verfahren ohne *Peel-off*-Technik (mittlere und rechte Spalte in Abbildung 5.5) zeigt dieser Vergleichstest, dass Mol₃D und MC₃D bei der Berechnung von Streukarten sehr ähnliche Ergebnisse pro Zeiteinheit produzieren, also eine vergleichbare Effizienz aufweisen. Dies ist aufgrund der engen Verwandtschaft und des nur marginal veränderten Algorithmus zu erwarten gewesen.

Die *Peel-off*-Technik hingegen liefert bei vergleichbarer Programmlaufzeit eine deutlich verbesserte Photonenstatistik. Die statistische Natur des Verfahrens ist aufgrund der vielen auftreffenden Photonen (vgl. Abbildung 5.5 links) kaum noch zu erkennen. Nur in den Bereichen, in denen sich das Vorzeichen der Q- und U-Stokes-Vektoren ändert, sind am äußeren Rand der Scheibe einzelne eintreffende Photonenpakete auszumachen.

Um eine bessere Vergleichbarkeit zu ermöglichen, wird der radiale Verlauf des Fluxes der linearen Polarisation aller drei Methoden miteinander verglichen. Aufgrund des statistischen Verfahrens sowie der Rotationssymmetrie der Scheibe werden zu diesem Zweck die in der oberen Reihe von Abbildung 5.7 dargestellten Flusskarten der linearen Polarisation azimuthal gemittelt und miteinander verglichen. Die resultierenden Verläufe sind in Abbildung 5.6 dargestellt.

Es lässt sich festhalten, dass Mol₃D ohne die Verwendung der *Peel-off*-Technik und MC₃D im Rahmen der jeweiligen Schwankungen übereinstimmende Ergebnisse liefern. Die Unterschiede resultieren einzig aus der Anzahl und Verteilung der Photonen, die beim Beobachter auftreffen. Auch ist dies unter anderem die Erklärung dafür, weshalb der radiale Verlauf unter Verwendung der *Peel-off*-Technik knapp unter dem der anderen beiden Methoden liegt. Wie später noch diskutiert wird, sorgt eine geringe Anzahl an verwendeten Photonen und die daraus resultierende schlechte Photonenstatistik tendenziell dafür, dass der Fluss der einzeln auftreffenden Photonen den korrekt berechneten Fluss überschätzt.

Als zweites wird angenommen, dass die Scheibe mit einer Inklination von $i = 80^\circ$ zum Beobachter geneigt erscheint. Die weiteren Parameter und Scheibeneigenschaften werden nicht geändert. Kirchschlager und Wolf [2014] haben gezeigt, dass für diese Kombination aus Wellenlänge, Orientierung der Scheibe sowie den gewählten

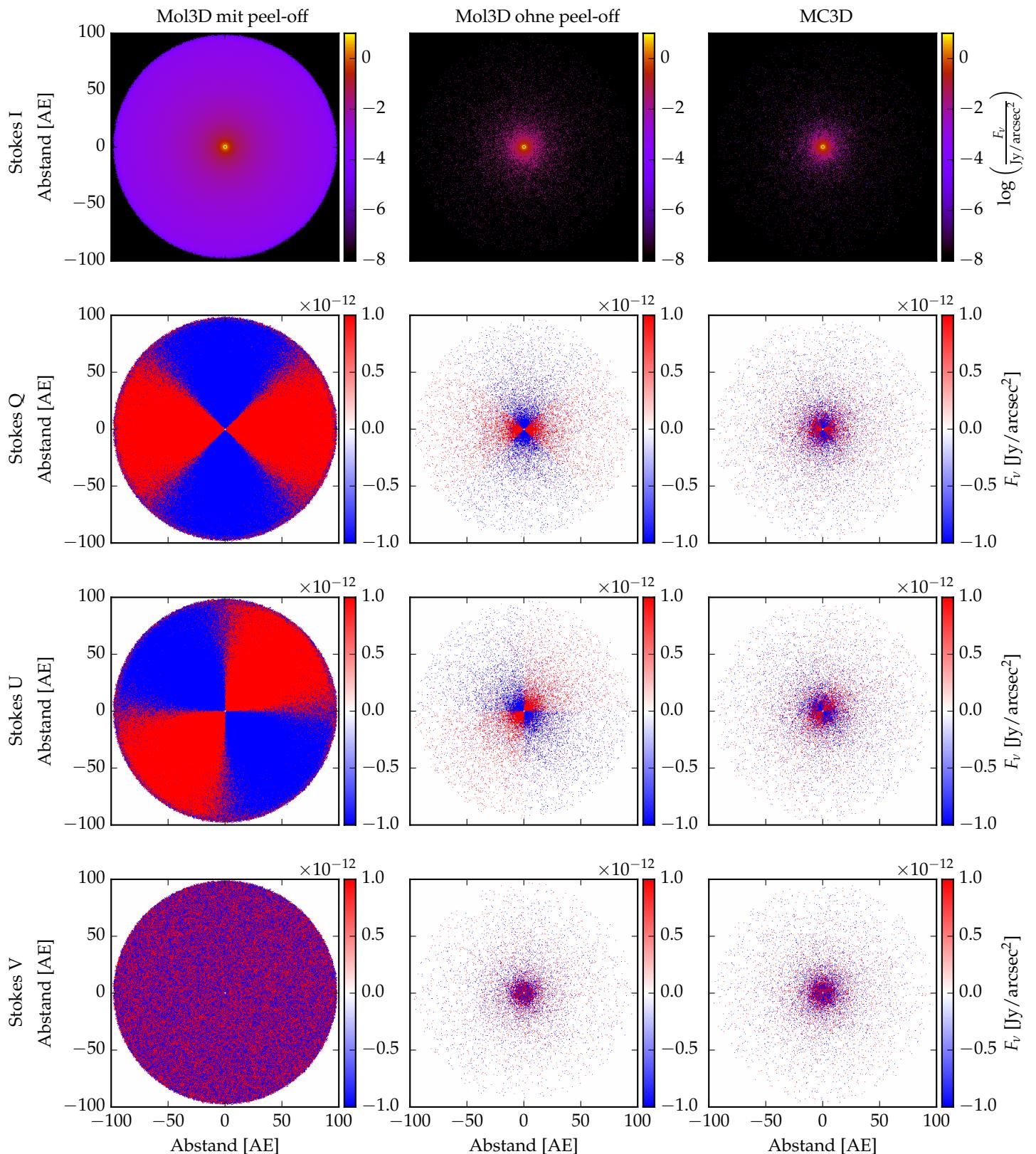


Abbildung 5.5 – Stokes-Komponenten I, Q, U und V im Vergleich mit MC3D für ein Modell einer typischen protoplanetaren Scheibe in Draufsicht ($i = 0^\circ$).

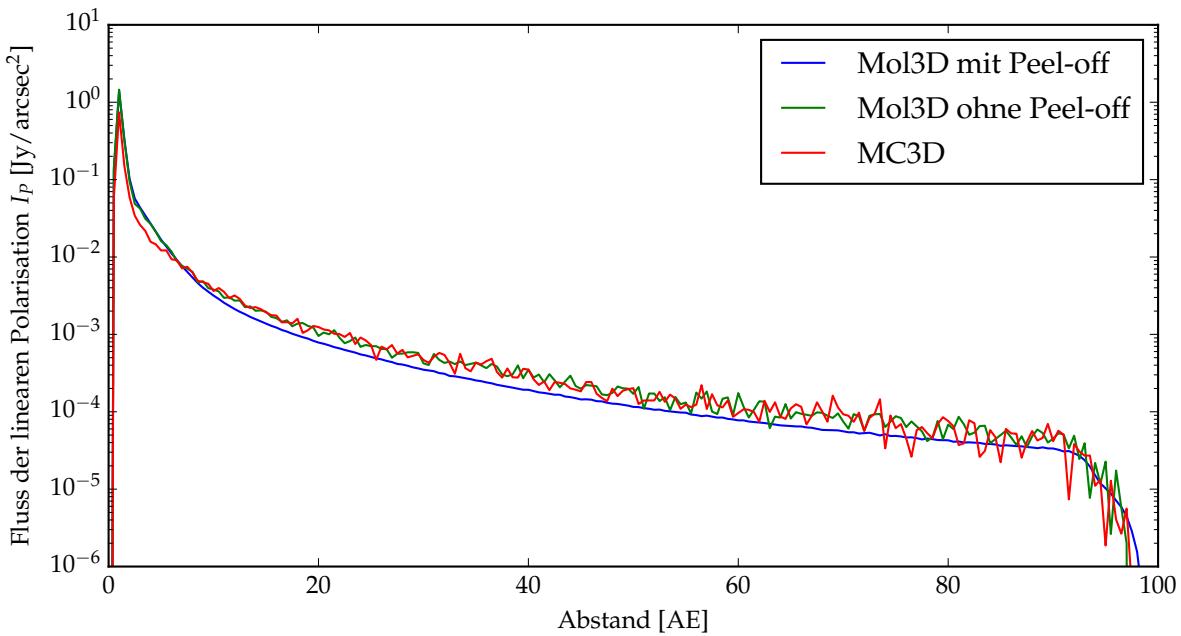


Abbildung 5.6 – Azimutal gemittelter Verlauf des Flusses der linearen Polarisation von *Mol3D* im Vergleich zu *MC3D*.

Staubeigenschaften ein Umkippen der Polarisationswinkel¹ zu erwarten ist. Die Autoren dieser Studie führen diesen Effekt auf die Winkelabhängigkeit der Polarisation ($P = -M_{12}/M_{11}$, vgl. auch Abschnitt 4.2.2) der Mie-Theorie sowie Mehrfachstreuung zurück [vgl. auch Kataoka u. a. 2015; Fischer u. a. 1994].

In der unteren Reihe von Abbildung 5.7 sind die mit *Mol3D* sowie mit *MC3D* berechneten Streukarten dargestellt. Dabei entspricht die mit *MC3D* erzeugte Karte (rechts unten) der des mittleren Bildes in Abbildung 10 in Kirchschlager und Wolf [2014]. Der einzige Unterschied ist, dass für diese Arbeit nicht die Rotationssymmetrie der betrachteten Scheibe ausgenutzt wird.

Es zeigt sich, dass *Mol3D* auch in diesem Fall qualitativ die Streukarte, inklusive des oben geschilderten Effekts des Polarisationskipps, korrekt berechnet. Dabei fallen zwei minimale Unterschiede auf. Der Erste ist, dass die *Peel-off*-Technik (Bild links unten) zwar grundsätzlich in der Lage ist das Polarisationskippen zu reproduzieren, aber der Grad der Polarisation, ausgedrückt durch die Länge der Polarisationsvektoren, deutlich geringer als der der Ergebnisse ohne *Peel-off*-Technik ist. Dies kann auf mehrere Gründe zurückgeführt werden.

Zunächst ist die *Peel-off*-Technik nur eine Näherung. Die zusätzlich generierten Photonen werden nur mit der Wahrscheinlichkeit, dass sie zum Beobachter gestreut werden sowie der optischen Tiefe (siehe Gl. 4.23) auf dem Weg zum Beobachter gewichtet. Dieses Vorgehen entspricht einem Strahlenverfolgungsalgorithmus. Daher können potenzielle, auf diesem Weg auftretende Streuereignisse nicht berücksichtigt werden. Auf der anderen Seite ist die Anzahl der Photonen, insbesondere in den

¹ engl.: polarisation reversal

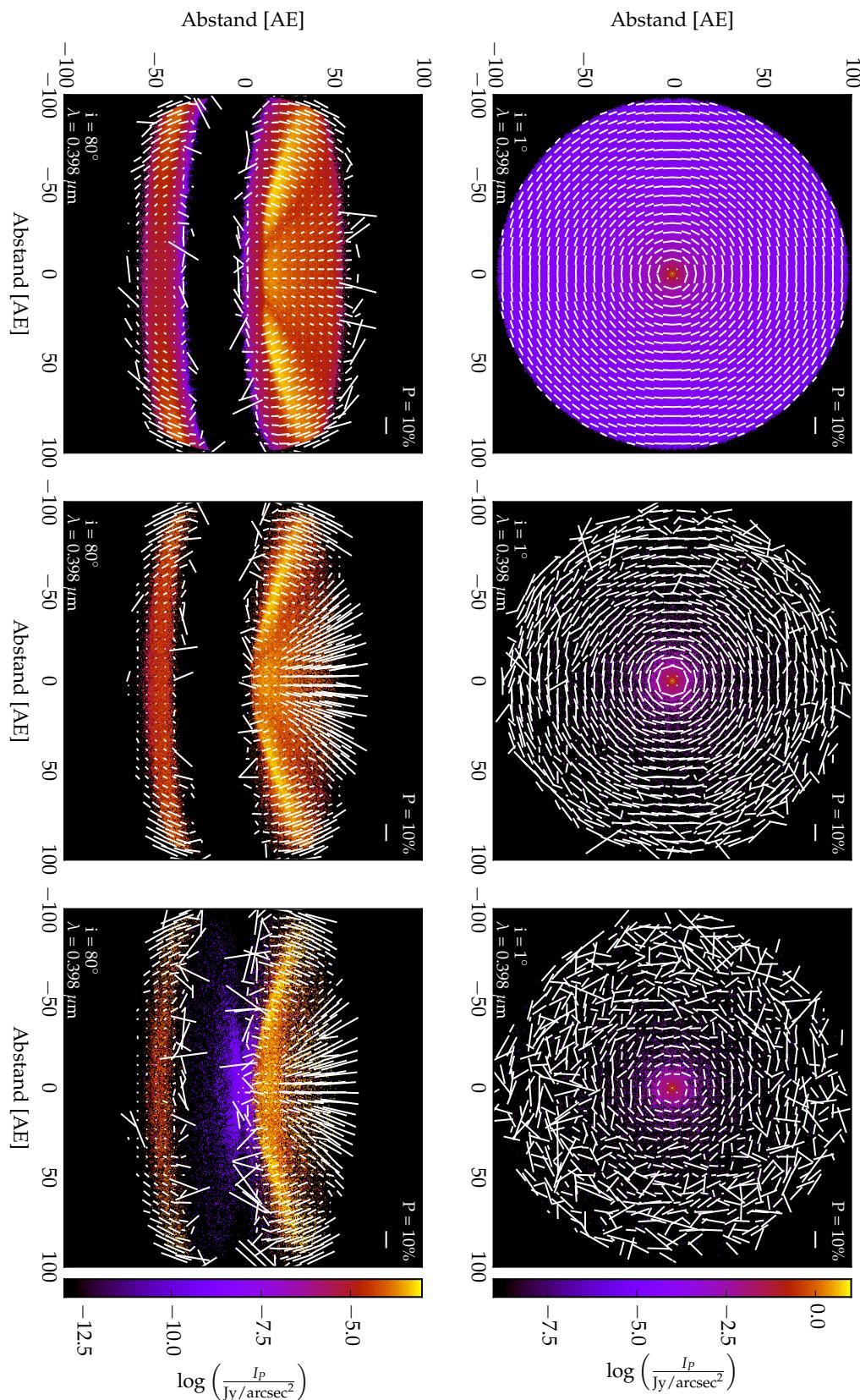


Abbildung 5.7 – Fluss der linearen Polarisation im Vergleich mit MC₃D für ein Modell einer typischen protoplanetaren Scheibe. Die Scheibe erscheint einmal in Draufsicht (obere Reihe) und einmal mit einer Inklination von $i = 80^\circ$.

Bereichen, in denen die größten Unterschiede zu beobachten sind, sehr gering. Da eine schlechte Photonenstatistik tendenziell zu einem höheren Polarisationsgrad führt (vgl. die äußereren Scheibenbereiche in der oben Reihe von Abbildung 5.7), kann dieser Effekt auch auf die zu geringe Anzahl an Photonen zurückgeführt werden. Es liegt also ein Diskretisierungsproblem² vor.

Der zweite Unterschied ist, dass in der MC₃D-Streukarte unterhalb der Scheibenmittelebene ein schwacher Fluss zu erkennen ist (violett dargestellt), während diese Bereiche in *Mol3D* in beiden Berechnungsfällen keinen Fluss in dieser Größenordnung aufweisen (opakes Band). Aufgrund der Staubmasse der Scheibe ($M_{\text{Staub}} = 10^{-4} M_{\odot}$) ist diese für die direkte Sternstrahlung optisch dick und die von MC₃D berechnete Strahlung kann daher nur durch Mehrfachstreuung erklärt werden. Da aus diesen Scheibenbereichen jedoch aufgrund der geometrischen Ausrichtung der Scheibe kein nennenswerter Streufluss zu erwarten ist und aufgrund der konsistenten Ergebnisse beider *Mol3D*-Methoden, wird nicht weiter auf dieses potenzielle numerische Artefakt eingegangen.

Die vollständigen Streu- und Polarisationskarten in Anlehnung an Abbildung 10 aus der Arbeit von Kirchschlager und Wolf [2014] sind in Anhang A.7 (Abbildungen A.5 und A.6) dieser Arbeit einzusehen. Für die räumlich aufgelösten Reemissionskarten ergibt sich eine ähnlich gute Übereinstimmung mit MC₃D. Da eine ausführliche Diskussion der Ergebnisse keinen Mehrwert bietet, wird in dieser Arbeit darauf verzichtet.

5.4 LINIENSTRAHLUNG

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass *Mol3D* verlässliche Linienspektren und räumlich aufgelöste Linienkarten berechnen kann. Zu diesem Zweck werden, wie zuvor im Fall der Kontinuumsstrahlung die Ergebnisse typischer Modelle protoplanetarer Scheiben mit publizierten Studien verglichen, sowie ein quantitativer Vergleich mit dem URAN(IA)-Softwarepaket durchgeführt.

5.4.1 Räumlich aufgelöste Molekülllinien

Zunächst werden räumlich aufgelöste Geschwindigkeitskarten des HCO⁺-Moleküls berechnet und mit publizierten Studien qualitativ verglichen. Es wird daher ein Scheibenmodell gewählt, welches mit dem in den Studien von Pavlyuchenkov u. a. [2007, Abbildung 1] und Semenov u. a. [2008] vorgestellten Modell in erster Näherung übereinstimmt. Das dort verwendete Scheibenmodell ist zur Verdeutlichung im Anhang in Abbildung A.3 dargestellt.

Da in den Studien die genaue Beschreibung der verwendeten Scheibenparameter nicht vollständig dargelegt ist, wird ein typisches, aufgeweitetes Dichteprofil nach Shakura und Sunyaev [1973, Gleichung 2.2] verwendet und die beschreibenden Parameter aus den oben genannten Studien abgeleitet.

² diskrete Energieportion der Photonen

Des Weiteren werden drei verschiedene Temperaturmodelle betrachtet. Zum einen ein Modell mit einem radialen Gradienten, aber isothermen Verlauf in z-Richtung (nG-T), zum anderen eine analytische Temperaturverteilung mit einem Gradienten sowohl in radialer als auch vertikaler Richtung (G-T). Als dritte Temperaturverteilung wird die des Staubs angenommen, die *Mol3D* konsistent mithilfe des Monte-Carlo-Verfahrens aus der Staubdichteverteilung berechnet.

Es zeigt sich, dass die zu dem vorgegebenen Dichteprofil gehörende Staubtemperatur (MC-T) im Innenbereich der Scheibe deutlich höher ist und sich auch nicht so stark auffächert wie die analytische Temperaturverteilung mit vertikalem Gradienten. Dennoch sind beide Temperaturverläufe oberhalb der Scheibe in guter Näherung vergleichbar.

Parameter	Wert(e)
$T_{\text{Stern}} [\text{K}]$	4 000
$R_{\text{Stern}} [R_{\odot}]$	2.36
$L_{\text{Stern}} [L_{\odot}]$	1.6
$M_{\text{Stern}} [M_{\odot}]$	0.7
$R_{\text{innen}} [\text{AE}]$	0.37
$R_{\text{außen}} [\text{AE}]$	800
$M_{\text{Staub}} [M_{\odot}]$	$7 \cdot 10^{-4}$
$M_{\text{Ges}} [M_{\odot}]$	0.07
$N(\text{HCO}^+)/N(\text{H}_2)$	10^{-9}
α	3.025
β	1.4
$h_0 [\text{AE}]$	12
$\rho_{\text{Staub}} [\text{g/cm}^3]$	2.5
$v_{\text{turb}} [\text{m/s}]$	100
$d [\text{pc}]$	140

Generell wird in den Studien im dritten Teil dieser Arbeit, soweit nicht explizit anders angegeben, von einer in der gesamten Scheibe konstanten Molekülhäufigkeit relativ zum Wasserstoffmolekül ausgegangen. Um eine Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#) zu ermöglichen, wird zusätzlich zur konstanten Häufigkeitsverteilung eine geschichtete HCO^+ -Verteilung betrachtet. In diesem einfachen Modell wird angenommen, dass das HCO^+ -Molekül nur oberhalb von 15° von der Scheibenmittelebene aus gesehen existiert.

Insgesamt werden zu jeder der drei Temperaturverteilungen zwei Molekülverteilungen betrachtet und verglichen. Die verwendete H_2 -Dichtestruktur, das Geschwindigkeitsfeld, die verschiedenen Temperaturverteilungen, sowie die geschichtete Molekülverteilung sind in Abbildung 5.8 dargestellt. Die vollständigen Stern- und Scheibenparameter sind zur besseren Übersicht in Tabelle 5.2 zusammengefasst. Die Besetzungszahlen werden mit der LVG-Methode berechnet.

Im Folgenden wird der $J = (4-3)$ Übergang des HCO^+ -Moleküls betrachtet, wobei Staubemission und -absorption vernachlässigt werden. In Abbildung 5.9 sind die räumlich aufgelösten Linienkarten des $v = -0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskanals für alle betrachteten Modelle in Einheiten der Helligkeitstemperatur T_B dargestellt. Diese Bereiche der Scheibe bewegen sich nach Definition auf den Beobachter zu (Blauverschiebung). Im Vergleich zu den Linienkarten, die in Abbildung 2 der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#) dargestellt sind, ist die Rotationsrichtung der Scheibe von *Mol3D* entgegengesetzt. Daher wird dort der $v = +0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskanal dargestellt. Die zitierte Abbildung ist zur Verdeutlichung im Anhang

Tabelle 5.2 – Verwendete Stern- und Scheibenparameter für die Vergleichsstudie zur Linienspektroskopie

Abbildung 5.9 sind die räumlich aufgelösten Linienkarten des $v = -0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskanals für alle betrachteten Modelle in Einheiten der Helligkeitstemperatur T_B dargestellt. Diese Bereiche der Scheibe bewegen sich nach Definition auf den Beobachter zu (Blauverschiebung). Im Vergleich zu den Linienkarten, die in Abbildung 2 der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#) dargestellt sind, ist die Rotationsrichtung der Scheibe von *Mol3D* entgegengesetzt. Daher wird dort der $v = +0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskanal dargestellt. Die zitierte Abbildung ist zur Verdeutlichung im Anhang

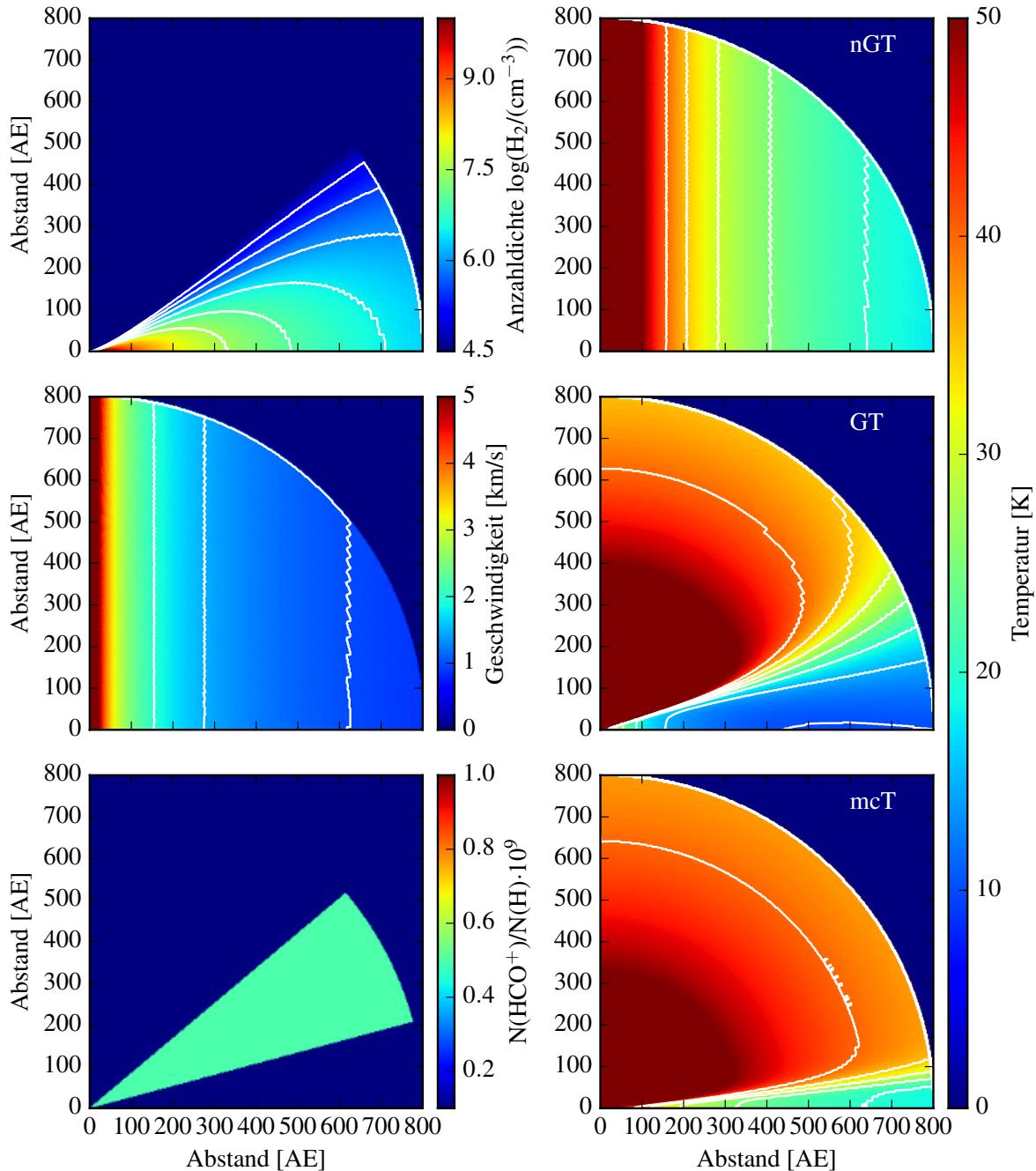


Abbildung 5.8 – Verwendete Scheibenmodelle für den Vergleich von *Mol3D* mit URAN(IA), sowie mit der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#). In der rechten Spalte sind die drei betrachteten Temperaturverteilungen dargestellt. Weitere Details sind dem Text zu entnehmen.

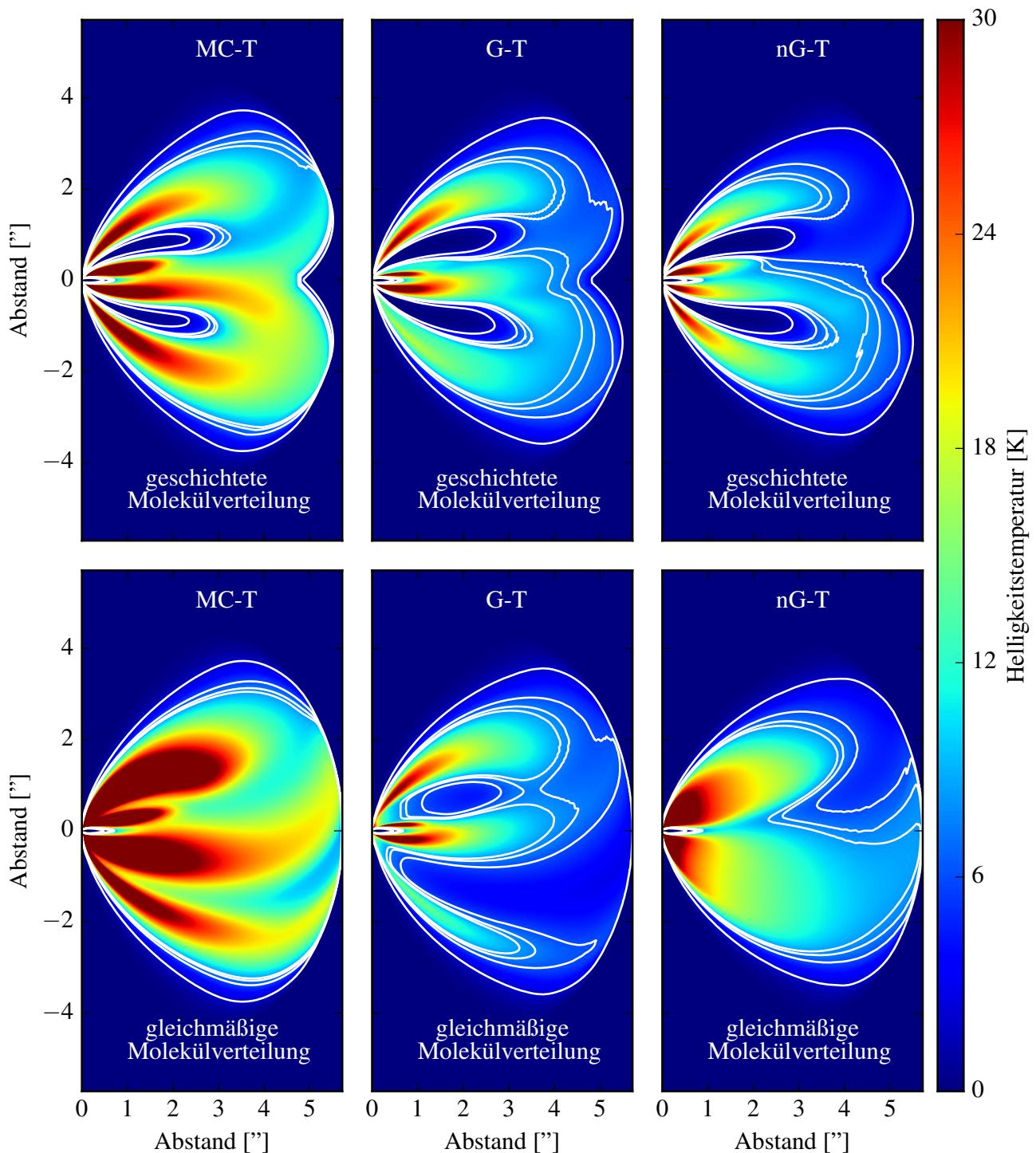


Abbildung 5.9 – HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten für sechs verschiedene Scheibenmodelle bei einer Inklination von 60° . Dargestellt ist der $v = -0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskanal. Die Intensität ist in Einheiten der Helligkeitstemperatur durch die Farbskalierung gegeben. Die Besetzungszahlen wurden mit der LVG-Methode berechnet.

(Abb. A.4) beigefügt.

Es zeigt sich, dass die mit *Mol3D* berechneten Geschwindigkeitskarten in guter Übereinstimmung mit denen aus der Studie von Semenov u. a. [2008] stehen. Dies umfasst sowohl die räumliche Verteilung der Linienemission als auch die qualitative Übereinstimmung der berechneten Helligkeitstemperatur des (4-3) Übergangs. Dies gilt insbesondere für das Modell mit vertikal isothermen Temperaturverlauf (nG-T) und einer konstanten Molekülhäufigkeit (Abbildung 5.9 unten rechts). Der Unterschied zu dem Emissionsmuster für das Modell mit einem vertikalen Temperaturgradienten ist eindeutig. Es lassen sich die Bereiche der kalten Scheibenmittelebene deutlich identifizieren und nur die heißen Scheibenoberflächen tragen zur Linienemission dieses (4-3) Übergangs bei.

Wird eine geschichtete Molekülverteilung angenommen (obere Reihe in Abbildung 5.9), so ist der Unterschied zwischen den beiden analytischen Temperaturverteilungen nur noch in Details auszumachen. Aufgrund der fehlenden Emission aus der Scheibenmittelebene zeigen beide Geschwindigkeitskarten Linienemission nur in den obersten Schichten der Scheibe. Der größte Unterschied ist in der Asymmetrie der Linienstrahlung des G-T-Modells auszumachen, welcher auf die Orientierung der Scheibe zum Beobachter zurückzuführen ist. Die Emission ober- und unterhalb der Scheibenmittelebene entstammt aufgrund der optischen Tiefe unterschiedlichen Tiefenschichten der Scheibe, wo wiederum aufgrund des angenommenen Gradienten unterschiedliche Temperaturen herrschen. Da dies bei dem nG-T-Modell nicht der Fall ist, ergibt sich ein nahezu symmetrisches Emissionsmuster.

Die Modelle mit berechneter Temperaturverteilung (MC-T, Abbildung 5.9 links) unterscheiden sich auf den ersten Blick durch die deutlich höheren Helligkeitstemperaturen. Dies liegt hauptsächlich in der deutlich höheren Temperatur der Scheibe begründet (vgl. Abbildung 5.8 rechts Mitte und unten). Qualitativ sind sie aber sehr gut mit denen der G-T-Modelle vergleichbar, da sie auch die kalten Bereiche der Scheibenmittelebene abbilden, auch wenn, aufgrund des leicht anderen Verlaufs der Temperaturstruktur, dies nicht so deutlich erscheint, wie bei den G-T-Modellen.

5.4.2 Quantitativer Vergleich der Linienspektren

Nachdem gezeigt wurde, dass die aufgelösten Linienkarten qualitativ mit ausgesuchten Studien in Übereinstimmung stehen, wird im Folgenden quantitativ gezeigt, dass alle Methoden zur Berechnung der Linienspektren korrekt implementiert wurden und damit zuverlässige Ergebnisse liefern.

Zu diesem Zweck werden die HCO^+ -Besetzungszahlen einer typischen protoplanetaren Scheibe unter Verwendung aller drei Methoden (LTE, FEP, LVG) mit *Mol3D* und mit URAN(IA), sowie im Anschluss die jeweiligen Spektren des (4-3) Übergangs berechnet. Für diesen Vergleich wird wieder das im vorigen Abschnitt dargestellte Scheibenmodell verwendet (siehe Abbildung 5.9). Für die Gasttemperatur wird das oben vorgestellte analytische Modell mit vertikalem Temperaturgradienten (G-T) gewählt, sowie ein in der gesamten Scheibe konstantes Molekülverhältnis von $\text{N}(\text{HCO}^+)/\text{N}(\text{H}_2) = 1 \cdot 10^{-9}$ verwendet.

Die Reemission des Staubs wird auch für diesen Vergleich vernachlässigt, da das URAN(IA)-Paket nicht ohne Weiteres in der Lage ist, diese vergleichbar zu berücksichtigen. Der Vergleich der Linienspektren ist ausreichend, da eine fehlerhafte Berechnung der Besetzungszahlen konsequenterweise zu inkorrekten Spektren führt. Aus diesem Grund werden die aus den verschiedenen Berechnungsmethoden resultierenden Besetzungszahlen dargestellt und diskutiert, aber nicht explizit mit den von URAN(IA) berechneten verglichen.

Dieser Test stellt zudem sicher, dass der neue Strahlungsverfolgungsalgorithmus im Fall der Moleküllinien fehlerfrei arbeitet.

In Abbildung 5.10 ist die Anregungstemperatur (siehe Gleichung 3.16) für verschiedene HCO^+ -Übergänge und die angesprochenen Berechnungsmethoden dargestellt. Die Übergänge wurden aufgrund der Überlegung ausgewählt, dass ALMA in der Lage sein wird, diese in verschiedenen Bändern zu beobachten (vgl. hierzu auch Tabelle 6.4 im dritten Teil dieser Arbeit). Es lassen sich folgende Unterschiede erkennen: Zum einen ist die Anregungstemperatur im LTE-Fall für jeden Übergang identisch. Dies ist eine direkte Folge aus der zugrunde liegenden Annahme, dass die Anregungstemperatur der Gastemperatur entspricht.

Zum anderen ist zu erkennen, dass sich die resultierenden Anregungstemperaturen der FEP- und LVG-Methode sehr ähnlich sind. Da beide Methoden denselben Formalismus verwenden und die LVG-Methode im optisch dünnen Fall in die FEP-Methode übergeht (vgl. Abschnitt 3.2.2), ist diese Ähnlichkeit der Ergebnisse zu erwarten. Insbesondere für höhere Übergänge und der damit einhergehenden sinkenden optischen Tiefe, nähern sich die Anregungstemperaturen einander an. Weiter ist bei beiden Methoden im (1-0) Übergang ein dunkler Bereich in der oberen Schicht der Scheibe auszumachen. Die dort auftretenden negativen Temperaturen sind auf eine Besetzungsinvolution (Maser-Effekt) zurückzuführen. Im Vergleich mit der LTE-Lösung lässt sich die schon in Abschnitt 3.2.2 diskutierte Annahme ableiten, dass die mit der LTE-Methode berechneten Besetzungszahlen in den optisch dicken Bereichen der Scheibe sehr gut mit denen der FEP- und LVG-Methode vergleichbar sind. Allerdings ist offensichtlich, dass die LTE-Annahme in optisch dünnen Bereichen wie der Scheibenoberfläche sowie bei höheren Rotationsübergängen nicht in der Lage ist, die Besetzungszahlen zuverlässig zu bestimmen.

Im Anschluss der Berechnung der Besetzungszahlen werden die Linienspektren erzeugt. Dazu werden für jede Methode 81 räumlich aufgelöste Flusskarten berechnet und die Flussdichte jeweils einer Geschwindigkeitskarte über die Fläche des Detektors aufintegriert. Für diesen Test wird wieder angenommen, dass die Scheibe vom Beobachter aus in Draufsicht erscheint. Aus diesem Grund hat das zugrunde liegende Keplersche Geschwindigkeitsfeld keinen Einfluss auf die Spektren und die Breite der Linien ist einzig durch die thermische und mikro-turbulente Verbreiterung gegeben (siehe auch Abschnitt 4.2.4).

Die resultierenden HCO^+ -Spektren des (4-3) Übergangs sind in Abbildung 5.11 dargestellt. Um eine Vergleichbarkeit herzustellen, sind die mit dem URAN(IA)-Softwarepaket berechneten Spektren ebenfalls in dem Diagramm enthalten. Zusätzlich ist die Lösung der beschleunigten Monte-Carlo-Methode (ART) dargestellt (schwarz), die

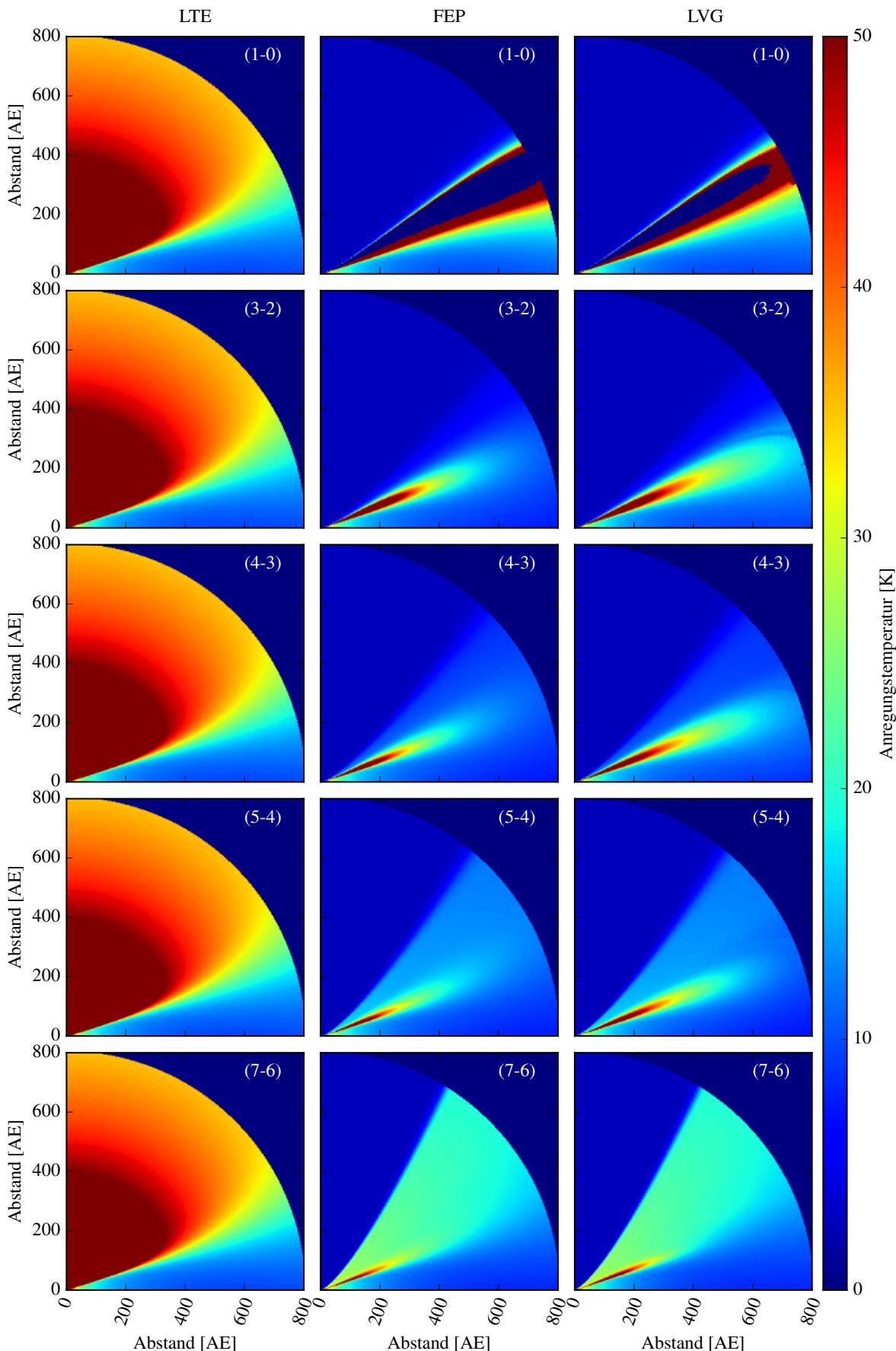


Abbildung 5.10 – Mit der LTE-, FEP- und LVG-Methode berechnete HCO^+ Besetzungszahlen für eine typische protoplanetare Scheibe mit vertikalem Temperaturgradienten. Dargestellt ist die Anregungstemperatur (Formel 3.16) für ausgewählte mit ALMA beobachtbare HCO^+ -Übergänge.

in URAN(IA) implementiert ist. Diese Lösung kann als exakte Lösung des Problems angesehen werden und dient daher als Referenz für die approximativen Methoden. Alle Spektren sind auf den maximalen Wert der LTE-Lösung von URAN(IA) normiert.

Festzustellen ist, dass URAN(IA) und *Mol3D* vergleichbare HCO^+ (4-3) Spektren mit marginalen Abweichungen von weniger als 1% produzieren. Wie in den Grundlagen in Abschnitt 3.2.2 angedeutet, überschätzt die LTE-Methode den Netto-Fluss der Linie, während die FEP-Methode diesen unterschätzt. Die Spektren, die mit der LVG-Methode berechnet wurden, liegen jeweils zwischen den Ergebnissen der oben genannten Methoden und sind mit denen der ART-Methode sehr gut vergleichbar. Auch ist die LTE-Methode nicht in der Lage die Abflachung der anderen Spektren um die zentrale Wellenlänge ($v = 0$) zu reproduzieren. Diese lässt sich auf einen Selbstabsorptionseffekt in den höheren Scheibenschichten aufgrund des vorliegenden Temperaturgradienten zurückführen.

In diesem vorliegenden Fall beträgt die Zeit zur Berechnung der Besetzungszahlen mit der ART-Methode ca. eine Stunde. Die LVG- und FEP-Methoden benötigen nur wenige Sekunden und die LTE-Methode schafft die Berechnung in weniger als einer Sekunde.

Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit der Studie von Pavlyuchenkov u. a. [2007], welche approximative Methoden zur Berechnung der Besetzungszahlen im Kontext protoplanetarer Scheiben miteinander vergleicht. Die wichtigste Erkenntnis ist, dass die LVG-Methode für zirkumstellare Scheiben sehr gute Ergebnisse bei gleichzeitig geringer Rechenzeit liefert, d. h. einen guten Kompromiss zwischen Geschwindigkeit und Verlässlichkeit der Ergebnisse bietet.

Aus diesem Abschnitt ist festzuhalten, dass *Mol3D* in der Lage ist, die räumlich aufgelöste Linienemissionen und die zugehörigen Spektren einfacher sowie komplexer Modelle protoplanetarer Scheiben verlässlich zu berechnen. Damit steht einer Anwendung auf diesem Gebiet nichts im Weg.

5.5 TECHNISCHE DETAILS

Eine ausführliche Diskussion über die technischen Details von *Mol3D* würde an dieser Stelle über den Rahmen der Arbeit hinausgehen und ist in Abschnitt A im Anhang einzusehen. Dort wird zum einen die Laufzeit zur Berechnung der Temperaturverteilung einer typischen protoplanetaren Scheibe mit der von MC₃D benötigten Laufzeit verglichen (Abschnitt A.3). Weiter wird die Effektivität der Parallelisierung untersucht (Abschnitt A.4) sowie die Wahl des Zufallszahlengenerators diskutiert (Abschnitt A.5).

5.6 BEDEUTUNG DER ENTWICKLUNG FÜR DIESE ARBEIT

Die Entwicklung von *Mol3D* ist Hauptbestandteil dieser vorliegenden Arbeit. Da *Mol3D* ein sehr breites Funktionsspektrum bietet und da es aufgrund des mo-

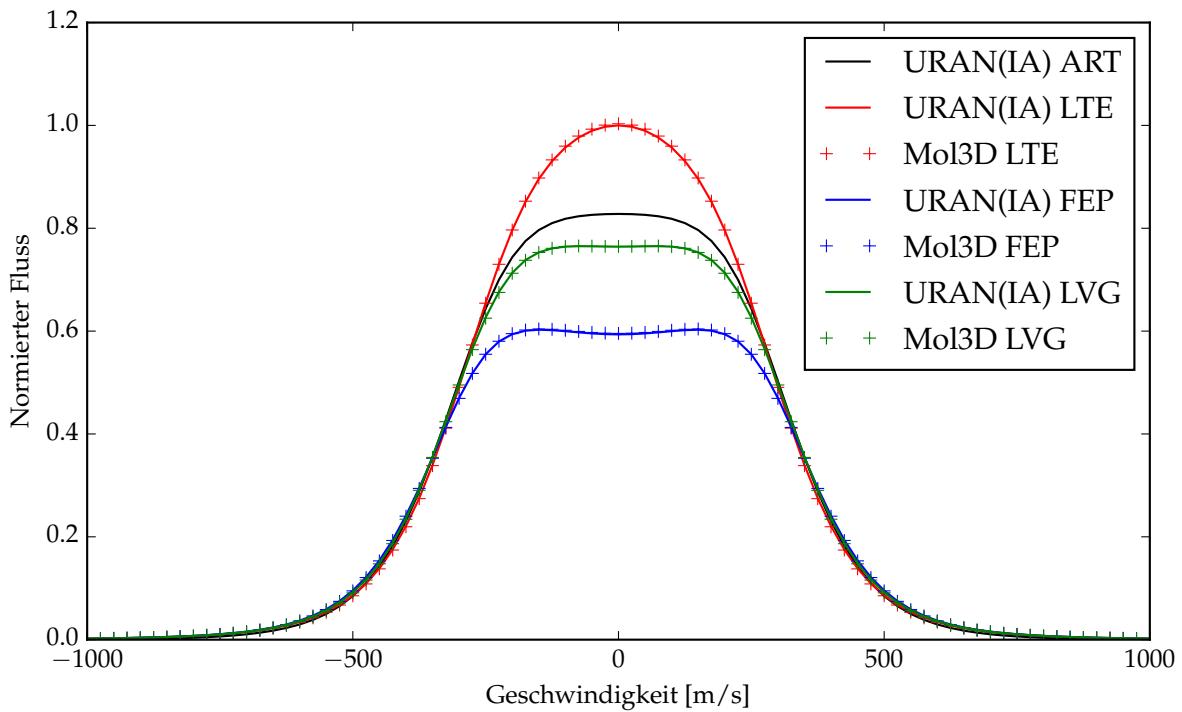


Abbildung 5.11 – Vergleich des HCO^+ (4-3) Spektrums für verschiedene Berechnungsmethoden der Besetzungszahlen. Durchgezogene Linien stehen für die Ergebnisse mit URAN(IA) und Punkte markieren die Ergebnisse von *Mol3D*. Unterschiedliche Farben kennzeichnen die Berechnungsmethoden. Beide Programme berechnen sehr vergleichbare Spektren (die Unterschiede sind geringer als 0.5%).

dularen Aufbaus sehr einfach zu erweitern ist, soll es in naher Zukunft MC₃D für verschiedenste Themen rund um den Strahlungstransport in protoplanetaren Scheiben ablösen bzw. ergänzen. Daher wurde *Mol3D* in enger Zusammenarbeit mit aktuellen Studien entwickelt, um auftretende Probleme direkt erkennen und beheben zu können. Diese Studien, die sich mit der Beobachtbarkeit von lokalen Strukturen in protoplanetaren Scheiben mithilfe von Molekülübergängen beschäftigen, sind im dritten Teil dieser Arbeit (Kapitel 6 und 7) dargestellt.

Somit steht der Arbeitsgruppe *Stern- und Planetenentstehung* in Kiel ein modernes, leistungsfähiges und getestetes Programm zu Verfügung und ergänzt damit ideal die vorhandene Software.

Auch weitere in Kiel entwickelte Strahlungstransportprogramme haben deutlich von der Entwicklung und den Erfahrungen von *Mol3D* profitiert. So ist unter anderem der in *Mol3D* verwendete Formalismus zur effizienten Berechnung der Staubtemperatur, sowie der gesamte Algorithmus des Linien-Strahlungstransports in das Polaris-Programm³ (Reissl u. a. eingereicht 2015) eingeflossen.

³ <http://www1.astrophysik.uni-kiel.de/~polaris/>

Teil III

STUDIEN

*The most exciting phrase to hear in science,
the one that heralds the most discoveries, is not
“Eureka!” (I found it!) but
“That’s funny...”*

— Isaac Asimov

6

NACHWEIS VON SCHEIBENLÜCKEN MITHILFE VON MOLEKÜLLINNIEN

*Die in diesem Kapitel vorgestellte Fallstudie basiert auf den Ergebnissen, die in der Arbeit von Ober u. a. [2015] in der Fachzeitschrift **Astronomy & Astrophysics** publiziert sind. Sie beantwortet die Frage, ob Lücken in protoplanetaren Scheiben mithilfe von Beobachtungen von Moleküllinien identifiziert werden können und wenn ja, unter welchen Voraussetzungen dies möglich ist.*

6.1 EINLEITUNG UND MOTIVATION

Heutzutage gilt es als erwiesen, dass Planeten in zirkumstellaren Scheiben um Vor-Hauptreihensterne entstehen und sich dort entwickeln [siehe z. B. Mordasini u. a. 2010]. Ein Abriss der Entwicklungsgeschichte von der Sternentstehung bis hin zu protoplanetaren Scheiben ist in Kapitel 2 dargestellt. Der Schwerpunkt dieser Studie liegt auf den durch Planeten induzierten Strukturen (insbesondere Lücken¹) sowie deren Nachweis.

Während ihres Entstehungsprozesses beeinflussen die neu entstandenen Planeten aufgrund ihres Gravitationspotentials die Scheibe [Goldreich und Tremaine 1980]. Es bilden sich charakteristische lokale und globale Strukturen wie Spiralarme, innere Löcher oder Lücken aus. Die Beobachtung bzw. der Nachweis von solchen Strukturen erlaubt es daher indirekte Rückschlüsse über die Existenz von Planeten zu ziehen. So können neue Erkenntnisse über die relevanten physikalischen Prozesse der Planet-Scheibe-Wechselwirkung gewonnen werden.

Die Arbeiten von Wolf und D'Angelo [2005] und Ruge u. a. [2013] haben gezeigt, dass es möglich ist Scheibenlücken im Kontinuum für verschiedenste protoplanetare Scheiben und ALMA-Konfigurationen zu beobachten. Auch wurde in der weiterführenden Studie von Ruge u. a. [2014] untersucht, unter welchen Voraussetzungen Lücken sowohl im Streu- als auch im Reemissionslicht beobachtbar sind.

Im Gegensatz zu diesen Kontinuumsstudien existieren so gut wie keine komplementären Studien, die sich mit der Beobachtbarkeit von Scheibenlücken mit räumlich aufgelösten Moleküllinien beschäftigen. An dieser Stelle sei zum Beispiel die Arbeit von Semenov u. a. [2008] erwähnt. In dieser theoretischen Arbeit wurde ge-

¹ engl.: gaps

zeigt, dass man anhand von räumlich aufgelösten HCO^+ -Linien Aussagen über die Temperaturschichtung sowie die chemische Zusammensetzung der Scheiben ableiten kann. Dutrey u. a. [2008] haben gezeigt, dass es mit spektroskopisch aufgelösten aber räumlich unaufgelösten Beobachtungen möglich ist, die Ausdehnung des inneren Rands der Scheiben einzuschränken. Dazu wurde die radiale Abhängigkeit des Rotationsgeschwindigkeitsfelds ausgenutzt. Im Hinblick auf die Fertigstellung von ALMA konnten Cleeves u. a. [2011] mithilfe von simulierten, räumlich aufgelösten Moleküllinien (CO , H_2CO_2) zeigen, dass ALMA in der Lage sein wird, große innere Löcher ($R \sim 45$ AE) zu identifizieren. Dies konnte mittlerweile auch durch verschiedene weitere Arbeiten bestätigt werden. Zum Beispiel waren Casassus u. a. [2013b] in der Lage in der ersten Beobachtungsphase von ALMA Linienemission im staubfreien inneren Loch von HD 142527 nachzuweisen. Weiter wurde in der Studie auch der Gasfluss über eine Scheibenlücke im Staub nachgewiesen, die den Autoren zufolge wahrscheinlich durch die Existenz eines eingebetteten Planeten hervorgerufen wird. Dazu wurden die unterschiedlichen optischen Eigenschaften (insbesondere die optische Tiefe) der beobachteten Moleküllinien ausgenutzt.

Leider lässt sich der Hauptmassenanteil von protoplanetaren Scheiben, kalter molekularer Wasserstoff (H_2), nur sehr schwierig direkt beobachten. Dies liegt hauptsächlich an dem fehlenden elektrischen Dipolmoment (siehe Abschnitt 3.2.1). Daher müssen Informationen über die Scheibendynamik, (Gas-)Temperatur, Dichte und chemische Zusammensetzung aus Beobachtungen anderer Moleküle mit niedrigerer Anregungstemperatur abgeleitet werden. Hauptsächlich konzentrieren sich daher diese Beobachtungen auf das Kohlenmonoxid ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$)-Molekül, welches niedrige Anregungstemperaturen und hohe Häufigkeiten aufweist. Durch diese Beobachtungen und die der zugehörigen CO-Isotopologe (z. B. $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{13}\text{C}^{16}\text{O}$) konnten erstmals die physikalischen Eigenschaften sowie die (vertikale) Gas-Temperaturstruktur von jungen zirkumstellaren Scheiben vermessen werden [z. B. Piétu u. a. 2007]. Auch konnten durch umfangreiche Studien weitere Moleküle wie HCO^+ , H_2CO , CS , CN , und HCN in den Scheiben um sonnenähnliche Sterne nachgewiesen werden [Kastner u. a. 1997; Öberg u. a. 2010; Thi u. a. 2004]. Kürzlich ist es Chapillon u. a. [2012a] gelungen, das massereichere HC_3N -Molekül in der Scheibe um die Sterne GO Tau und MWC 480 mithilfe des IRAM- Großteleskops (Durchmesser 30 m) im Millimeterwellenlängenbereich zu detektieren.

Mit ALMA wird es in Zukunft möglich sein, die molekulare Gaszusammensetzung in den potenziellen Planetenentstehungsgebieten protoplanetarer Scheiben abzuleiten und zu studieren. Rosenfeld u. a. [2013]; de Gregorio-Monsalvo u. a. [2013] haben zum Beispiel durch räumlich aufgelöste Beobachtungen von HD 163296 zeigen können, dass die CO-Emission nur aus einer schmalen Scheibenschicht² mit einem Öffnungswinkel von 15° von der Scheibenmittelebene stammt. Dies ist eine erste Bestätigung der durch Simulationen vorhergesagten Schichtung der verschiedenen Gasmoleküle. Weiter wurde erstmals, dank der bisher unerreichten Sensitivität die ALMA bietet, auch zyklisches C_3H_2 in dieser Scheibe nachgewiesen [Qi u. a. 2013].

² engl.: layer

Unter anderem bietet es sich aufgrund seiner chemischen Eigenschaften als Nachweismolekül für die Wechselwirkung der Scheibe mit hochenergetischer Strahlung (z. B. Röntgenstrahlung) an [Semenov und Wiebe 2011].

Die Identifikation von Lücken in protoplanetaren Scheiben mithilfe von Molekülbeobachtungen ist nicht in erster Linie dadurch motiviert, indirekt Planeten nachzuweisen. Vielmehr sollen komplementäre Beobachtungen von Staub und Molekülen dabei helfen, Aussagen über die Scheibenphysik durch Planet-Scheibe-Wechselwirkungen treffen zu können. Zum Beispiel hängt die resultierende Struktur der Scheibenlücke, welche durch Form und Tiefe in der Staub- und Gasverteilung definiert ist, nicht nur von der Masse des Planeten und den Staubkorneigenschaften (z. B. Größe der Staubteilchen) ab. Vielmehr konnten Paardekooper und Mellema [2004] zeigen, dass die Struktur der Lücke maßgeblich durch die Interaktion des Planeten mit der Gas- sowie der Staubscheibe hervorgerufen wird. So wird angenommen, dass große Staubkörner ($a > 150 \mu\text{m}$) in der Lage sind sich vom Gas zu lösen und sich am Rand der Lücke zu konzentrieren. Dies führt zu einer signifikanten Änderung des lokalen Staub-zu-Gas-Verhältnisses.

Auch muss eine Scheibenlücke nicht zwangsläufig in der Existenz eines eingebetteten Planeten begründet sein. So wurde in der Studie von Flock u. a. [2015] gezeigt, dass MRI-Turbulenz alleine, ohne Annahme eines Planeten, ausreichend ist, um eine signifikante und möglicherweise beobachtbare Scheibenlücke zu erzeugen. Auf der anderen Seite konnten Bruderer u. a. [2014] kürzlich CO-Emission aus dem inneren Loch der Staubscheibe um IRS 48 nachweisen. Sie schlußfolgerten, dass ein massiver innerer Planet oder Brauner Zwerg für die innere Auflösung der Scheibe verantwortlich ist. Weiter ist laut dieser Studie Photoevaporation oder Staubkornwachstum alleine nicht ausreichend, um die Beobachtungen erklären zu können. Aufgrund der Vielzahl unterschiedlicher Beobachtungen und theoretischer Vorhersagen ist es daher unumgänglich durch komplementäre Beobachtungen des Staubs und des Gases das Verständnis der vorherrschenden physikalischen Eigenschaften zu verifizieren. Insbesondere das Verständnis über die Interaktion zwischen der Staub- und Gaskomponente in den potenziellen Planetenentstehungsgebieten ist dabei von besonderer Relevanz. Dieser Ansatz, das Studium der Planet-Scheibe-Wechselwirkung durch Beobachtungen der Staub- und Gasverteilung, ist eine neue Herangehensweise um Rückschlüsse über die Scheibenphysik zu ziehen und die theoretischen Vorhersagen zu überprüfen.

Als ein erster Schritt wird dazu in der hier vorgestellten Studie diskutiert, unter welchen Voraussetzungen es möglich ist, Lücken in Scheiben mithilfe von räumlich und spektral aufgelösten Moleküllinien nachzuweisen. Um dies zu realisieren wurde das N-LTE Linien- und Staub-Strahlungstransportprogramm *Mol3D* entwickelt (siehe Kapitel 4).

Die hier vorgestellte Studie basiert auf Dichte- und Geschwindigkeitsverteilungen, die das Ergebnis von dreidimensionalen Hydrodynamik-Simulationen von protoplanetaren Scheiben mit eingebettetem Planeten sind. Sie wurden mit dem PLUTO-Programm [Mignone u. a. 2007] durchgeführt und in der Studie von Uribe u. a. [2011] vorgestellt. Die Scheibentemperatur des Staubs wird im Anschluss konsistent mit

Mol3D berechnet und die Geschwindigkeitskarten von insgesamt 32 Molekülübergängen werden simuliert. Diese werden wiederum an den CASA³-Simulator [Petry und CASA Development Team 2012] weitergeleitet, um realistische ALMA-Beobachtungen zu simulieren.

Zum Schluss werden die so erzeugten künstlichen Beobachtungsbilder ausgewertet, indem nach von Planeten induzierten Lücken gesucht wird. Basierend auf den Ergebnissen können so potenzielle zukünftige Beobachtungen mit ALMA von vergleichbaren protoplanetaren Scheiben vorbereitet werden. Dies ist unter anderem deshalb möglich, da in dieser Studie nicht nur eine exemplarische Fallstudie [wie z. B. Cleeves u. a. 2011] durchgeführt wird, sondern ein großer Parameterraum betrachtet wird. So wird unter anderem die Scheibenmasse, die Scheibenausdehnung sowie die Molekülzusammensetzung um zwei typische Vor-Hauptreihensterne (T Tauri, Herbig Ae) variiert.

6.2 VORSTELLUNG DES MODELLS

In diesem Abschnitt wird das zugrunde liegende Scheibenmodell vorgestellt. Die Ergebnisse von 3D Hydrodynamik-Simulationen werden an das zuvor entwickelte und getestete Strahlungstransportprogramm *Mol3D* übergeben, um die Molekül-emission von verschiedenen Linienübergängen zu berechnen. Anschließend werden aus den Geschwindigkeitskarten mithilfe des CASA-Simulators synthetische ALMA-Beobachtungen erzeugt. Die einzelnen Schritte werden im Folgenden im Detail beschrieben.

6.2.1 3D Hydrodynamik-Simulationen

In der Vorbereitung auf diese Studie wurden Simulationen mit einer analytischen Gasverteilung sowie einer scharfen radialsymmetrischen Scheibenlücke durchgeführt, welche komplett vom Staub und Gas befreit war. Die Ergebnisse dieser Simulationen erwiesen sich jedoch als unhaltbar. Der unrealistisch hohe Kontrast der Lücke zur Umgebung führt dazu, dass die Scheibenlücke für die im Rahmen dieser Studie betrachteten Planet-Scheibe-Konfigurationen (vergleiche Abschnitt 6.2.2) in fast allen Fällen detektierbar ist. Um die Lücke möglichst realistisch zu beschreiben und damit zuverlässige Vorhersagen über deren Beobachtbarkeit ableiten zu können, sind daher physikalisch begründete Annahmen über die Massenverteilung innerhalb sowie außerhalb der Lückenregion notwendig.

Aus diesem Grund wurde ein anderer Weg eingeschlagen und in dieser Studie die Ergebnisse von 3D Hydrodynamik-Simulationen anstatt analytischer Modelle verwendet. Diese Simulationen wurden mit dem in der Astrophysik weit verbreiteten und bekannten PLUTO-Programm⁴ [Mignone u. a. 2007] durchgeführt. Dabei wurde für die Zeitintegration ein Runge-Kutta-Löser zweiter Ordnung, für die räumliche

³ engl.: Common Astronomy Software Application, Version 4.2

⁴ <http://plutocode.ph.unito.it/>

Integration ein TVD⁵-Löser zweiter Ordnung und für die Berechnung der Riemann-Flüsse der eingebaute HLLC⁶-Löser verwendet. Der Aufbau der Simulationen wurde ursprünglich in der Studie von Uribe u. a. [2011] präsentiert und die hier verwendeten Scheibenmodelle sind in der Studie von Ruge u. a. [2013] dargestellt, die sich mit der Beobachtbarkeit von durch Planeten induzierten Lücken im Kontinuum beschäftigt. Betrachtet werden zwei komplementäre Scheibenmodelle. Zum einen eine Scheibe mit einem eingebetteten Jupiter-ähnlichen Planeten (Massenverhältnis von $M_{\text{Planet}}/M_{\text{Stern}} = 0.001$), welcher sich auf einer festen zirkularen Umlaufbahn befindet. Das zweite Scheibenmodell hat die gleichen physikalischen Eigenschaften. Allerdings ist in diesem Scheibenmodell kein eingebetteter Planet enthalten, welcher mit der Scheibe wechselwirken könnte. Aus diesem Grund ergeben sich in der Simulation auch keine vergleichbaren azimuthalen Strukturen und daher dient dieses Modell als (glattes) ungestörtes Referenzmodell.

Das Gitter wurde als sphärisch angenommen, wobei θ den Polarwinkel und ϕ den Azimuthalwinkel beschreibt. Dabei wurde die vertikale Ausdehnung des Rechengebiets auf Werte von $\theta \in [\pi/2 - 0.3, \pi/2 + 0.3]$ beschränkt, um die Berechnungen mit dem PLUTO-Programm zu beschleunigen. Dies ist ausreichend, da dieser Winkelbereich bereits vier Druckskalenhöhen über der Scheibenmittelebene abdeckt und die Scheibe in diesen Höhen kaum noch Masse aufweist. Für die Anfangsbedingungen wurde angenommen, dass zum einen die Gasscheibe ein Sub-Keplersches Rotationsprofil aufweist und zum anderen, dass die Dichteverteilung $\rho_0 \propto r^{-a}$ sowie die Schallgeschwindigkeit $c_s = c_0(r \sin \theta)^{-b}$ einem Potenzgesetz mit den jeweiligen Exponenten $a = 3/2$ bzw. $b = 0.5$ folgen. Daher wird die initiale Dichteverteilung wie folgt beschrieben⁷:

$$\rho(r, \theta) = (r \sin \theta)^{-\frac{3}{2}} \cdot \exp\left(\frac{\sin \theta - 1}{c_0^2}\right). \quad (6.1)$$

Die Scheibe wird durch die lokale isotherme Zustandsgleichung beschrieben. Für den Druck P gilt daher:

$$P = c_s^2 \rho. \quad (6.2)$$

Das Verhältnis von Druckskalenhöhe h zu radialer Ausdehnung der Scheibe wird als konstant angenommen, so dass gilt $h = H/(r \sin \theta) = 0.07$. Die Störung durch den Planeten wird durch ein gedämpftes Gravitationspotential beschrieben, welches wie folgt definiert ist:

$$\Phi(r, \theta) = -\frac{GM_p}{\sqrt{|\vec{r} - \vec{r}_p|^2 + \epsilon^2}}. \quad (6.3)$$

⁵ engl.: Total Variation Diminishing

⁶ Harten-Lax-van Leer-Contact

⁷ Anmerkung: In Gl. 6.1 beschreibt $\theta = \pi/2$ die Scheibenmittelebene. Dies ist auf die Definition der sphärischen Koordinaten im PLUTO-Programm zurückzuführen (vgl. Tabelle 6.1).

Programm	θ [rad]	ϕ [rad]	N_r	N_θ	N_ϕ
PLUTO	$[\pi/2 - 0.3, \pi/2 + 0.3]$	$[0, 2\pi]$	256	128	256
<i>Mol3D</i>	$[0, \pi]$	$[0, 2\pi]$	100	66	128

Tabelle 6.1 – Vergleich der Gitterparameter der beiden Programme. Der originale Datensatz der Hydrodynamik-Simulationen wurde reduziert, um die Daten effektiv mit *Mol3D* verarbeiten zu können.

In dieser Gleichung beschreibt ϵ einen Dämpfungsparameter, welcher als Teil des Hill-Radius [Hill 1878] definiert ist ($\epsilon = l \cdot r_p (M_p / (3M_{\text{Stern}}))^{1/3}$), wobei $l = 0.3$ angenommen wurde.

Für die originale HD-Simulation der Scheibe wurde diese mit einem Innenrand von 2 AE sowie mit einem Außenrand von 9 AE aufgesetzt. Der Planet befindet sich bei einer Entfernung von $r_p = 5$ AE. Um Randeffekte zu reduzieren, wurden für die Hydrodynamik-Simulationen Dämpfungszellen am Innen- und Außenrand eingeführt. Daher reicht der gesamte radiale Simulationsbereich effektiv von 1-10 AE.

Für den anschließenden dreidimensionalen Strahlungstransport müssen die Datensätze auf die Gitterstruktur von *Mol3D* angepasst werden, die sich beispielsweise in der Definition des Polarwinkels θ unterscheidet. Dazu werden zwei Zellen über bzw. unter der simulierten Scheibe hinzugefügt, um den gesamten $\theta \in [0, \pi]$ -Bereich auszufüllen, der mit dem PLUTO-Programm nicht mitsimuliert wurde. Weiter werden für die Strahlungstransportsimulationen jeweils zwei Zellen in jeder Richtung zusammengeführt. Dies ist nötig, um die Anzahl der Zellen zu reduzieren und damit die Speicherauslastung auf $\frac{1}{8}$ des ursprünglich benötigten Speicherbedarfs zu verringern⁸. Alle Gitterparameter der beiden Simulationen sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

6.2.2 Scheibenmodell

Die in Abschnitt 6.2.1 beschriebenen Hydrodynamik-Simulation basieren auf skalenlosen Einheiten. Daher ist es möglich, lineare Skalierungsparameter einzuführen, um die Scheibenmasse sowie die Ausdehnung der Scheibe (und damit auch die Breite der Lücke) skalieren zu können, damit sie typischen protoplanetaren oder Übergangsscheiben entsprechen. An dieser Stelle sei kurz angemerkt, dass diese Skalierung sicher nicht beliebig gewählt werden kann und die Scheibe je nach Kombination von Scheibenmasse und Ausdehnung andere physikalische Eigenschaften (z. B.

⁸ Anmerkung: Durch viele Optimierungen bei der Speicherauslastung wäre *Mol3D* mittlerweile ohne Weiteres in der Lage, die gesamten Daten der HD-Simulationen zu verarbeiten. Vergleichsrechnungen zeigen allerdings keine qualitativ abweichenden Ergebnisse.

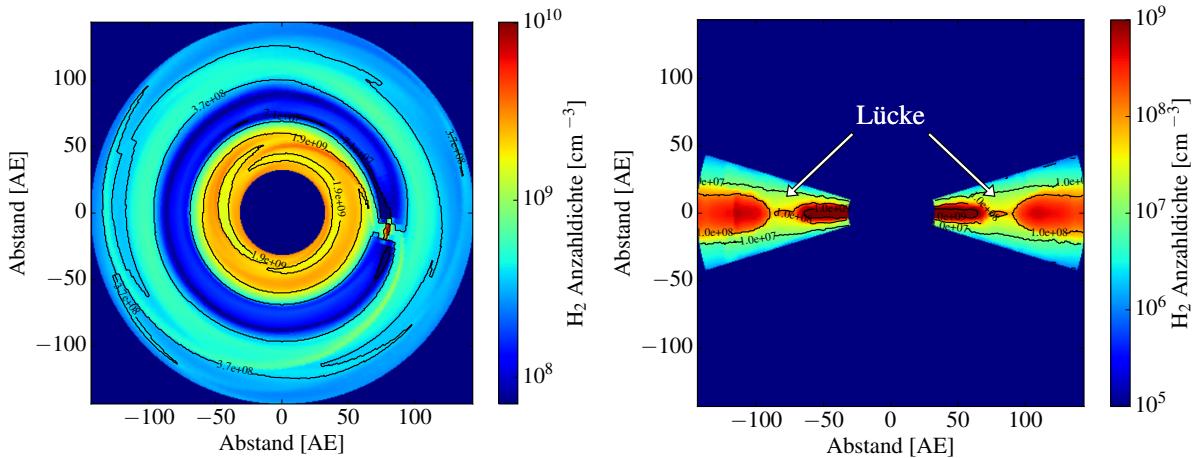


Abbildung 6.1 – Beispiel einer Hydrodynamik-Simulation mit eingebettetem Planeten (Massenverhältnis von $M_{\text{Planet}}/M_{\text{Stern}} = 0.001$) und einem Skalierungsfaktor von $k = 16$. Dargestellt sind die Schnitte durch die xy- bzw. xz-Ebene und die Dichte ist logarithmisch durch die Farbskala gegeben. Durch die Präsenz des Planeten hat sich eine prominente Lücke ausgebildet (siehe linkes Bild). Allerdings sind die oberen Schichten der Scheibe kaum durch den Planeten beeinflusst (rechtes Bild).

Selbstgravitation) aufweist, die im Rahmen der Hydrodynamik nicht berücksichtigt wurden.

Scheibendimension

Um den Innen- bzw. Außenrand der Scheibe skalieren zu können, wird der lineare Skalierungsparameter $k \in [7,..,25]$ definiert. Daher kann der Scheibeninnenrand Werte von $R_{\text{innen}} = k \cdot 2 \text{ AE}$ (also $R_{\text{innen}} \in [14,..,50 \text{ AE}]$) sowie der Scheibenaußengrenz Werte von $R_{\text{außen}} = k \cdot 9 \text{ AE}$ (folglich $R_{\text{außen}} \in [63,..,225 \text{ AE}]$) annehmen. Diese unterschiedlichen Scheibenausdehnungen sind daher in der Lage, verschiedene Stadien von zirkumstellaren Scheiben abzubilden, angefangen bei jungen kompakten protoplanetaren Scheiben bis zu weiter entwickelten Übergangs- und Trümmerscheiben mit großen inneren Löchern.

In der Abbildung 6.1 ist beispielsweise eine Dichteverteilung der Hydrodynamik-Simulation mit einem Skalierungsfaktor $k = 16$ dargestellt. Der eingebettete Jupiterähnliche Planet befindet sich auf einem zirkularen Orbit in einem Abstand von 80 AU. Die Scheibe reicht von $R_{\text{innen}} = 32 \text{ AU}$ bis $R_{\text{außen}} = 144 \text{ AU}$. Deutlich können charakteristische Strukturen aufgrund der Wechselwirkung zwischen dem Planeten und der Scheibe ausgemacht werden. Die auffälligste Struktur ist die deutliche Lücke, die sich in einer Entfernung von 68-92 AU befindet.

Betrachtet man die vertikale Scheibenstruktur (Abbildung 6.1, rechts), so erkennt man deutlich, dass der Planet nur die innersten Schichten, also die Scheibenmittelebene entlang seiner Bahn, penetriert. Auf die Oberfläche der Scheibe hat der Planet nur einen relativ geringen Einfluss. Dieser Effekt wurde in der Einleitung zu dieser Studie schon angesprochen und zeigt eindrucksvoll, dass ein eingebetteter Planet die

Scheibe eben nicht in eine innere und äußere Scheibe teilt, sondern quasi nur einen Tunnel erzeugt. Des Weiteren kann man auf der linken Seite von Abbildung 6.1, welche die Scheibenmittelebene darstellt, deutlich einen Spiralarm erkennen, der sich von der äußeren Scheibe am Planeten vorbei in die innere Scheibe fortsetzt. Allerdings ist auch diese Struktur am ausgeprägtesten in der Scheibenmittelebene. In der Oberfläche der Scheibe ist kaum eine Veränderung in der Dichtestruktur aufgrund des Spiralarms auszumachen.

Scheibenmasse

Diese Studie hat zum Ziel ein breites Spektrum an möglichen zirkumstellaren Scheiben abzudecken. Aus diesem Grund wird neben der Ausdehnung der Scheibe auch deren Masse skaliert. Zu diesem Zweck werden Scheibenmassen von $2.67 \cdot 10^{-1} M_{\odot}$ bis $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ gewählt. Dieser Massenbereich ist ein Ergebnis diverser Beobachtungen im (Sub-)Millimeter-Wellenlängenbereich, die in den Arbeiten von Andrews u. a. [2010, 2011] präsentiert sind und deckt massereiche protoplanetare Scheiben sowie Übergangsscheiben ab.

Staub- und Sterneigenschaften

Die Beobachtbarkeit von Scheibenlücken in der Staubreemission wurde in der vorangegangenen Arbeit von Ruge u. a. [2013] diskutiert. In dieser Arbeit wird der Staub zur konsistenten Beschreibung des Modells mitbehandelt. Dabei wird angenommen, dass der Staub aus einer Mischung von 62.5% astronomischen Silikaten sowie 37.5% Graphit besteht [Weingartner und Draine 2001] und sich die Staubkörner durch Vollkugeln beschreiben lassen. Die Größenverteilung folgt den Erkenntnissen von Dohnanyi [1969] und wird mit dem folgenden Potenzgesetz beschrieben:

$$n(a) \sim a^{-3.5}. \quad (6.4)$$

Der kleinste Staubkornradius wird zu $a_{\min} = 5 \text{ nm}$ und der maximale Staubkornradius mit $a_{\max} = 250 \text{ nm}$ angenommen. Diese Werte gehen auf die Modellierungen zum

interstellaren Medium zurück [Mathis u. a. 1977]. Eine detailliertere Ausführung zu dem benutzten Staubmodell findet sich in Kapitel 3.3.

Der Staub wird vom zentralen Stern geheizt. Im Rahmen dieser Studie werden zwei typische, junge Sterne (T Tauri und Herbig Ae) betrachtet. Die wichtigsten Parameter der Sterne sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst.

Tabelle 6.2 – Eigenschaften der betrachteten Vor-Hauptreihensterne

Parameter	T Tauri	Herbig Ae
$T_{\text{Stern}} [\text{K}]$	4000	9500
$R_{\text{Stern}} [\text{R}_{\odot}]$	2	2.48
$M_{\text{Stern}} [\text{M}_{\odot}]$	0.7	2.5
$L_{\text{Stern}} [\text{L}_{\odot}]$	0.92	43

Verteilung der betrachteten Moleküle

In diesem Abschnitt wird auf die Verteilung der jeweiligen Moleküle eingegangen. Es wird angenommen, dass das Massenverhältnis von Gas zu Staub 100 : 1 beträgt

und Gas und Staub perfekt aneinander koppeln.

Über die räumliche Verteilung der verschiedenen Molekül-Spezien relativ zu einander ist bis heute relativ wenig bekannt. Die wenigen Erkenntnisse beruhen zum einen auf Beobachtungen mit begrenzter räumlicher Auflösung oder numerischen Simulationen und sind teilweise kontrovers. Beispielsweise konnten Beobachtungen Kohlenstoffmonoxid-Emission aus den kalten Bereichen ($T \lesssim 20$ K) von protoplanetaren Scheiben nachweisen [Dartois u. a. 2003; Goto u. a. 2012], in denen CO eigentlich ausgefroren und demnach nicht beobachtbar sein sollte.

Aikawa und Nomura [2006] und Semenov u. a. [2006] brachten einen möglichen Ausweg ins Spiel. Sie postulierten, dass die CO-Häufigkeit in der Scheibenmittelebene aufgrund von vertikalen und radialen Durchmischungen deutlich höher sein könnte als bisher angenommen.

Dieser Idee folgend erstellten Hersant u. a. [2009] Simulationen zur chemischen Entwicklung von protoplanetaren Scheiben. Sie verglichen Modelle mit und ohne turbulente Mischungen sowie CO-Photodesorption. Allerdings ist auch die resultierende CO-Säulendichte dieser Modelle nicht mit den zur Verfügung stehenden Beobachtungen in Einklang zu bringen. Cleeves u. a. [2011] argumentierten, dass Scheibenlücken besser durch Röntgenstrahlung von der direkten Sternstrahlung geheizt werden können. Die dadurch erhöhte Temperatur führt dazu, dass Kohlenstoffmonoxid nicht auf den Staubkörnern ausgefroren ist und daher aufgrund des höheren Kontrasts potenziell eine bessere Beobachtbarkeit der Lücke ermöglicht.

Da die Debatte zu diesem Thema noch immer andauert und keine eindeutigen Erkenntnisse vorliegen, wird in dieser Studie angenommen, dass die relativen Molekülhäufigkeiten im Vergleich zu molekularem Wasserstoff in einem konstanten Verhältnis zueinander stehen. Die angenommenen Häufigkeiten gehen auf die in der Studie von Pavlyuchenkov u. a. [2007] präsentierten Werte zurück. Sie wurden mit einem chemischen Gas-Staub-Modell berechnet, welches die Oberflächenreaktionen mit einschließt. Diese basieren auf der UMIST 95-Datenbank [Millar u. a. 1997] für Gas-Phasen-Reaktionen. Dieser Ansatz erlaubt es, das Modell einfach zu halten und

Parameter	Wert(e)
R_{innen} [AE]	14 - 50
$R_{\text{außen}}$ [AE]	63 - 225
M_{Scheibe} [M_{\odot}]	$2.67 \cdot 10^{-1,-2,\dots,-5}$
ρ_{Staub} [g/cm^3]	2.5
a_{\min} [μm]	0.5
a_{\max} [μm]	250
v_{turb} [m/s]	100
Δv [m/s]	50
Inklination [$^{\circ}$]	0, 10
Entfernung [pc]	140
Beobachtungszeit [h]	3
max. Basislinien [km]	0.7 - 16.3

Tabelle 6.3 – Parameterraum der betrachteten Scheibenmodelle zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken durch Linienbeobachtungen

reduziert die komplexe Auswertung der Ergebnisse, ohne die qualitativen Aussagen zu beeinflussen (vgl. hierzu auch die Erkenntnisse in Kapitel 7 zu diesem Thema).

Der Linienstrahlungstransport

Die Besetzungszahlen werden mit der LVG-Methode (siehe Abschnitt 3.2.2) berechnet, welche sich für den Linienstrahlungstransport in protoplanetaren Scheiben bewährt hat. Basierend auf diesen Ergebnissen werden anschließend Geschwindigkeitskarten und Spektren für jede betrachtete Scheibenkonfiguration berechnet. Die Scheibe befindet sich in perfekter Kepler-Rotation. Die turbulente Geschwindigkeit (siehe Abschnitt 4.2.4) wird für alle Modelle fest zu $v_{\text{turb}} = 100 \text{ m/s}$ gesetzt. Dies ist ein Ergebnis früherer Linienbeobachtungen [z. B. Piétu u. a. 2007; Chapillon u. a. 2012a]. Die Frequenz-Auflösung wird zu 50 m/s festgesetzt. Für alle Modelle mit 10° Inklination werden 141 und für die Karten in Draufsicht 71 Geschwindigkeitskarten berechnet. Der gesamte Parameterraum ist in Tabelle 6.3 zusammengefasst.

6.3 ERGEBNISSE

6.3.1 Ideale Linienkarten

In diesem Abschnitt werden zunächst die Auswirkungen der durch Planeten hervorgerufenen Störungen in der Gas- und Staubverteilung zirkumstellarer Scheiben auf die idealen Geschwindigkeitskarten präsentiert. Nach einer Diskussion der einzelnen Effekte wird in Abschnitt 6.3.4 gezeigt, unter welchen Bedingungen sich diese Strukturen, insbesondere die Scheibenlücken, mit ALMA beobachten lassen. Um quantitative Aussagen über die Beobachtbarkeit der Lücken zu ermöglichen, wird im Folgenden der Begriff *Tiefe der Lücke* als der Kontrast der Flussdichten innerhalb der Lücke zu ihrem Rand definiert.

Optischer Tiefeneffekt

Zu Beginn der Diskussion dieses Effekts werden die idealen Geschwindigkeitskarten des $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergangs betrachtet, mit dem T Tauri-Stern als Strahlungsquelle. Die Scheibe hat eine Masse von $2.67 \cdot 10^{-5} \text{ M}_\odot$ [z. B. HD 166191, Coka Tau/4; Kennedy u. a. 2014; Forrest u. a. 2004; D'Alessio u. a. 2005], welche am unteren Ende typischer Scheibenmassen der hier betrachteten Objekte einzuordnen ist. Ihr Innenrand hat einen Radius von 32 AE und der Außenradius beträgt 144 AE, wobei sich der Orbit des eingebetteten Planeten bei ~ 80 AE befindet. Die Scheibenlücke hat eine Breite von ca. 12 AE. Die Inklination der Scheibe zum Beobachter beträgt 0° . Die Scheibe erscheint also in Draufsicht. Unter diesem Beobachtungswinkel erscheint die Lücke in der betrachteten CO-Linienemission als ein symmetrischer Ring, der sich über die verschiedenen Geschwindigkeitskarten nicht verändert. Dies liegt daran, dass die Liniendichte bei dieser Konfiguration nur durch die thermische und mikro-turbulente Geschwindigkeit gegeben ist, da unter der Annahme perfekter Kepler-Rotation kei-

ne zusätzliche Geschwindigkeitskomponente in Richtung des Beobachters existiert (siehe Abbildung 6.2; weitere Details siehe Abschnitt 3.2).

Es zeigt sich jedoch, dass der Kontrast zwischen der Lücke und seiner Kante nicht konstant über alle Geschwindigkeitskanäle ist. Die Tiefe der Lücke variiert mit der optischen Tiefe des gewählten Linienübergangs. Allerdings stellt sich für die hier vorgestellten Scheibenmodelle heraus, dass der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang in der Liniенmitte auch für die masseärmsten Scheiben optisch dick ist. Aus diesem Grund ist die $\tau = 1$ -Oberfläche, die Tiefe der Scheibe, die effektiv beobachtet werden kann, abhängig vom Geschwindigkeitskanal. Daher kann in den Linienflügeln tiefer in die Scheibe hineingeschaut werden als in der Liniensmitte (bei einer Geschwindigkeit von $v = 0 \text{ m/s}$). Als Konsequenz ergibt sich, dass für dieses Modell die Lücke am besten bei Geschwindigkeiten von $\pm 300 \text{ m/s}$ zu beobachten ist. In der Liniensmitte ist die Scheibe so optisch dick, dass die Linienemission, die beobachtet werden kann, nur aus den obersten Schichten der Scheibe stammt und die unterliegenden Bereiche überdeckt.

Wie schon zu Beginn dieser Studie (vgl. Abschnitt 6.2.1) kurz angerissen wurde, sind als Ergebnis der Hydrodynamik-Simulationen die obersten Schichten der Scheibe nur minimal durch den Einfluss des Planeten gestört. Konsequenterweise ist selbst bei massearmen Scheiben die Lücke in der Liniensmitte durch die optisch dicke Oberfläche des betrachteten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergangs der Scheibe verdeckt. In Analogie sind auch weitere Signaturen der Planet-Scheibe-Interaktion, wie z. B. der stark ausgeprägte Spiralarm des äußeren Scheibebereichs, am besten in den Linienflügeln zu erkennen (in diesem Fall: $v = \pm 400 \text{ m/s}$).

Im zweiten Schritt wird die optische Tiefe des Modells weiter angehoben, indem die Scheibenmasse um zwei Größenordnungen erhöht wird (m. a. W. $2.67 \cdot 10^{-3} \text{ M}_\odot$). Diese Scheibenkonfiguration (Scheibenmasse und -ausdehnung) steht exemplarisch für eine typische protoplanetare Scheibe. Es zeigt sich (siehe Abbildung 6.3), dass die Lücke in den Geschwindigkeitskarten kaum noch nachweisbar ist. Die Linie ist selbst in den Linienflügeln optisch dick und nur die ungestörte Scheibenoberfläche über der Lücke kann beobachtet werden. Daher erscheint die Scheibe in der Linienemission glatt und ungestört, ohne eindeutige Hinweise auf eine mögliche Planet-Scheibe-Interaktion.

Eine bedeutende Erkenntnis dieser Studie ist, dass dieser Effekt ein grundlegendes Problem bei der Beobachtung mit $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ darstellt. Insbesondere dann, wenn Strukturen nachgewiesen werden sollen, die sich nahe der Scheibenmittelebene befinden. Aus diesem Grund ist der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang kein geeigneter Indikator für Scheibenlücken typischer protoplanetarer Scheiben. Für diesen Fall müssen bei ähnlicher Wellenlänge andere Moleküle bzw. Isotopologe mit geringerer relativer Häufigkeit, betrachtet werden, die es erlauben, tiefer gelegene Scheibenschichten zu beobachten.

Veranschaulicht wird dies auf Grundlage des $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergangs (Abb. 6.4). Aufgrund der geringen Häufigkeit dieses Kohlenstoffmonoxid-Isotopologs ist diese Linie optisch weniger dick und die Emission stammt somit aus tiefer gelegenen Schichten der Scheibe. Die benötigten Anregungsenergien der niedrigen Energieniveaus

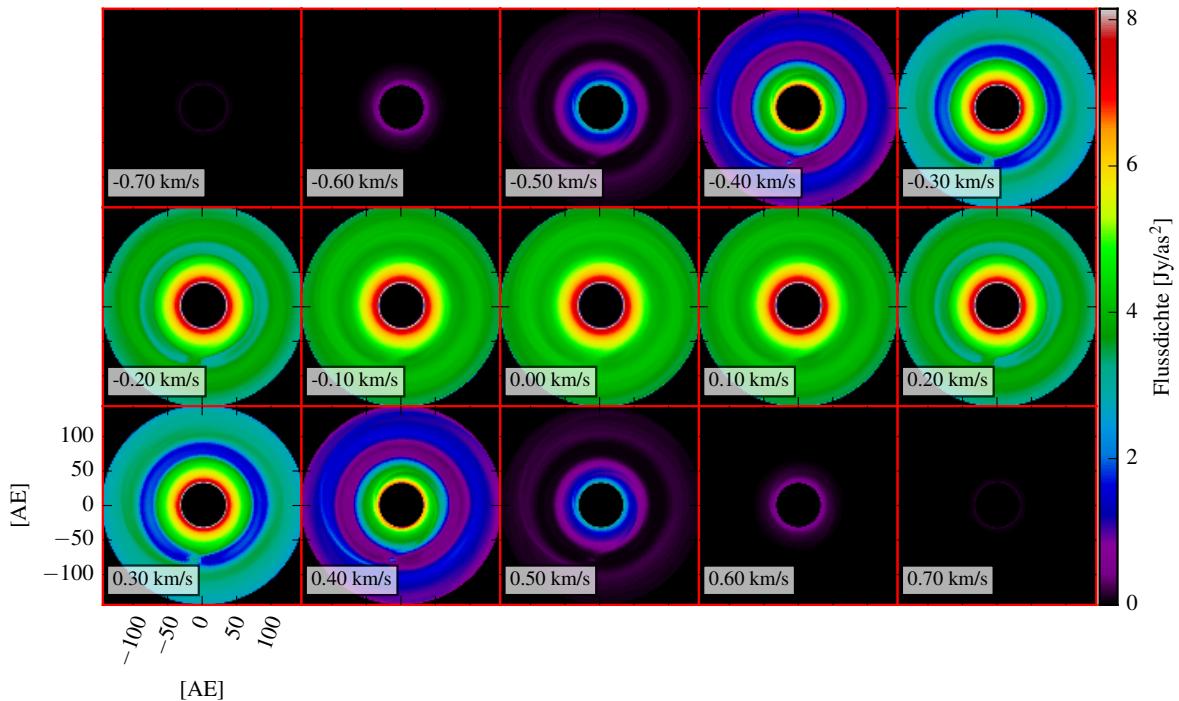


Abbildung 6.2 – Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Die Lücke ist deutlich zu erkennen, besonders in den Linienflügeln. Auch der markante Spiralarm kann bei $v = \pm 400$ m/s identifiziert werden.

dieses Moleküls sind sehr ähnlich zum $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Molekül. Es kann daher in guter Näherung davon ausgegangen werden, dass sich beide Molekülsparten nur durch ihre relativen Häufigkeiten unterscheiden. Es zeigt sich, dass aus diesem Grund die Lücke desselben Scheibenmodells im Gegensatz zur optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Linie deutlich zu detektieren ist.

Die massereichsten Scheiben ($2.67 \cdot 10^{-1} M_{\odot}$), die im Rahmen dieser Studie untersucht wurden, zeigen keinerlei Anzeichen von Lücken in den hier betrachteten Linienübergängen (siehe Tabelle 6.4). Daher ist es aus den oben dargelegten Gründen für eine spezifische Molekülbeobachtung, mit dem Ziel durch Planeten induzierte Scheibenlücken zu entdecken, sinnvoll, die optische Dicke der Scheibe abzuschätzen (zum Beispiel aus ihrer aus Kontinuum-Beobachtungen abgeleiteten Masse), um das passende Molekül und den passenden Übergang auszuwählen.

Inklination der Scheibe

Im Gegensatz zum idealen Modell ohne Inklination der Scheibe ist in Abbildung 6.5 die Geschwindigkeitskarte einer Scheibe mit einer geringen Inklination von 10° dargestellt. Negative Geschwindigkeiten (obere linke Ecke) gehören zu Bereichen der Scheibe, die sich auf den Beobachter zu bewegen, Bereiche mit positiven Geschwindigkeiten (unten rechts) bewegen sich vom Beobachter weg. Lücken in geneig-

Molekül	Übergang	Frequenz [GHz]	ALMA Band	Häufigkeit N/N(H)	Sensitivität σ [mJy]	PWV [mm]
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$	(1-0)	115.27	3	$1 \cdot 10^{-4}$	7.46	5.2
	(2-1)	230.54	6		3.14	1.3
	(3-2)	345.80	7		4.12	0.66
	(4-3)	461.04	8		11.66	0.47
	(6-5)	691.47	9		38.02	0.47
$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$	(1-0)	109.78	3	$2 \cdot 10^{-7}$	3.68	2.7
	(2-1)	219.56	6		3.11	1.3
	(3-2)	329.33	7		6.2	0.66
	(4-3)	439.09	8		61.96	0.47
	(6-5)	658.55	9		38.66	0.47
HCO^+	(1-0)	89.19	3	$1 \cdot 10^{-8}$	3.87	5.2
	(3-2)	267.56	6		3.04	0.91
	(4-3)	356.73	7		4.63	0.66
	(5-4)	445.90	8		1087.7	0.47
	(7-6)	624.21	9		137.81	0.47
	(8-7)	713.34	9		112.10	0.47
HCN	(1-0)	88.63	3	$1 \cdot 10^{-9}$	3.89	5.2
	(3-2)	265.89	6		2.97	0.91
	(4-3)	354.51	7		4.48	0.66
	(5-4)	443.12	8		46.78	0.47
	(7-6)	620.30	9		$4.89 \cdot 10^5$	0.47
	(8-7)	708.88	9		59.91	0.47
CS	(2-1)	97.98	3	$1 \cdot 10^{-8}$	3.38	2.7
	(3-2)	146.97	4		3.17	1.8
	(5-4)	244.94	6		2.9	0.91
	(6-5)	293.91	7		3.82	0.91
	(7-6)	342.88	7		4.12	0.66
	(8-7)	391.85	8		9.77	0.47
	(9-8)	440.80	8		27.2	0.47
	(10-9)	489.75	8		32.11	0.47
	(13-12)	636.53	9		35.96	0.47
	(14-13)	685.44	9		33.13	0.47

Tabelle 6.4 – Eigenschaften der in dieser Studie betrachteten Molekülübergänge. Die Sensitivität und das Niederschlagswasser (PWV) ergeben sich aus dem *ALMA Sensitivity Calculator* (Version: April 2015) für eine dreistündige Beobachtung mit 50 Einzelantennen (12 m Durchmesser).

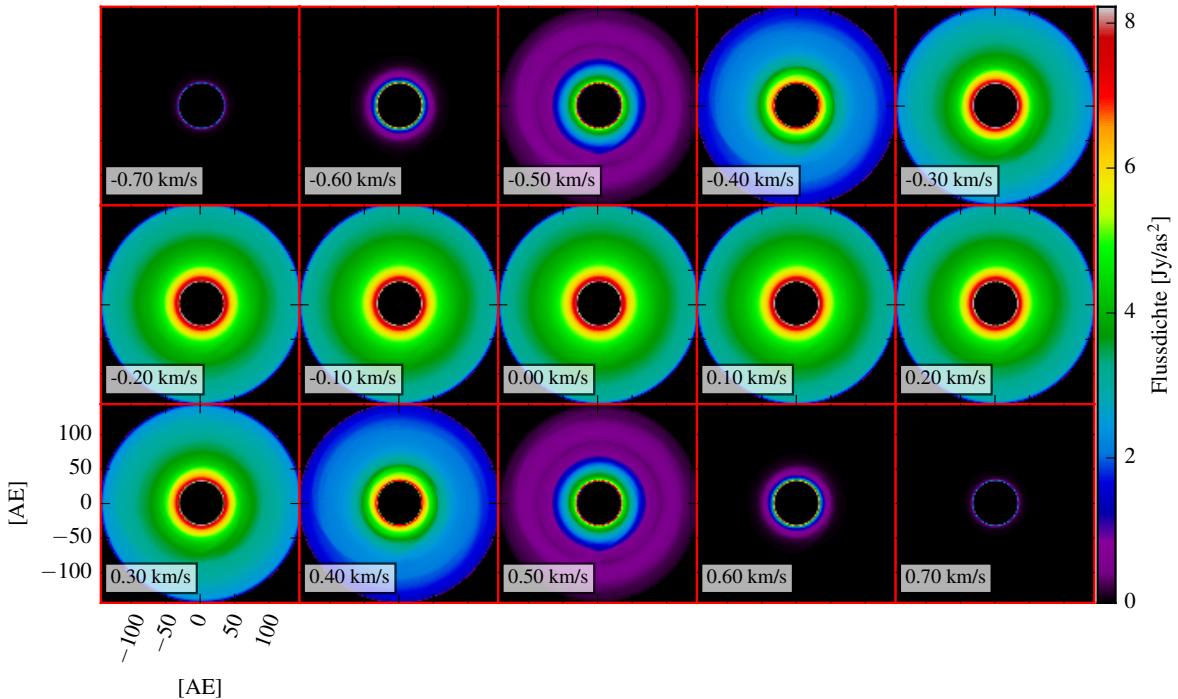


Abbildung 6.3 – Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der optischen Tiefe kommt die Linienemission nur aus den obersten Scheibenschichten, daher ist die Scheibenlücke kaum sichtbar. Nichtsdestotrotz ist die Flussdichte vergleichbar mit dem Modell 100-fach geringerer Scheibenmasse (Abb. 6.2).

ten Scheiben, und somit der Großteil potenzieller Ziele, werden sichtbar.

Aufgrund der Neigung der Scheibe hat das globale Rotationsfeld einen signifikanten Einfluss auf die Linienemission und erzeugt aufgrund des Doppler-Effekts das typische Linienmuster rotierender (zirkumstellarer) Scheiben (vgl. auch Abb. 5.9 in Abschnitt 5.4.1). Aus diesem Grund sind nur Ausschnitte der Lücke sichtbar und sie erscheint nicht als symmetrischer Ring wie im Fall der Staubreemission. Da das Gas im Bereich vor und hinter der Lücke entlang der Sichtlinie zum Beobachter einen großen Bereich von projizierten Geschwindigkeiten ($\gg v_{\text{turb}}$) abdeckt, wird diese aufgrund der Doppler-verschobenen Beiträge der Linie maskiert. Dieser Effekt ist in Abbildung 6.6 dargestellt und wird kurz detaillierter beleuchtet.

Das zugrunde liegende Scheibenmodell (Abb. 6.6, links) hat einen Außenradius von 117 AE und der Planet befindet sich bei 65 AE. Aufgrund der Inklination von 10° ist die Linie signifikant Doppler-verschoben. Die Geschwindigkeitskarte zeigt eine Lücke in der Orbitalregion des Planeten. Allerdings ist dies kein eindeutiges Anzeichen für eine Lücke. Aufgrund der projizierten Geschwindigkeit auf dem Sichtstrahl des Beobachters zeigt das ungestörte Scheibenmodell (siehe Abbildung 6.6, rechts) ebenfalls ein markantes lokales Minimum in derselben Scheibenregion. Demzufolge verdeckt das Emissionsmuster aufgrund des Einflusses des Geschwindigkeitsfelds

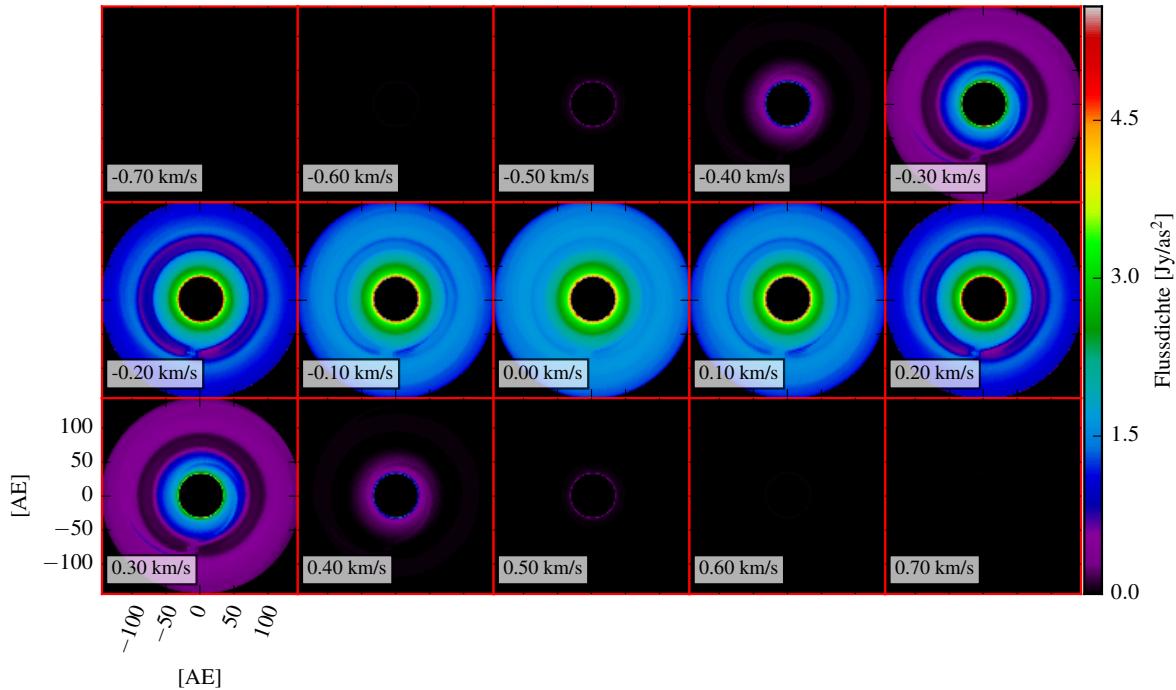


Abbildung 6.4 – Ideale $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der geringen Häufigkeit dieses Kohlenstoffmonoxid-Isotopologs ist die Lücke, im Gegensatz zum optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Übergang (vgl. Abb. 6.2), deutlich zu erkennen.

effektiv die Lücke und behindert insbesondere für optisch dünne Linien eine eindeutige Identifikation der Scheibenlücke. Eine mögliche Lösung ist es, stattdessen die über die Geschwindigkeit integrierten Flusskarten zur Lückendetektion zu verwenden (vgl. Abbildung 6.7). Für geringe Scheiben-Inklinationen weichen diese Flusskarten kaum von denen der Scheiben ab, die in Draufsicht erscheinen. Es zeigt sich, dass die Abweichung zwischen beiden Fällen für die in dieser Studie betrachtete geringe Inklination von 10° weniger als 5% beträgt. Die Geschwindigkeitsintegration hat weiter den Vorteil, dass das Muster verschwindet und die Lücke leicht zu identifizieren ist. Dennoch geht durch diese Methode die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Lückentiefe verloren. Daher sind die Geschwindigkeits-integrierten Karten durch den Linienfluss im Linienzentrum dominiert, welcher im Fall optisch dicker Linien nur aus den obersten Scheibenregionen kommt.

Einfluss des Zentralsterns

In der folgenden Diskussion wird der Herbig Ae-Stern als zentrale Strahlungsquelle angenommen und seine Auswirkungen auf die Detektierbarkeit von Scheibenlücken mithilfe von Moleküllinien diskutiert. Da die Scheibentemperatur im Vergleich zu der vom T Tauri-Stern aufgrund der ~ 45 -fachen Leuchtkraft deutlich höher ist, sind höhere Energieniveaus der Moleküle angeregt. Die Linienstrahlung aus den äußeren

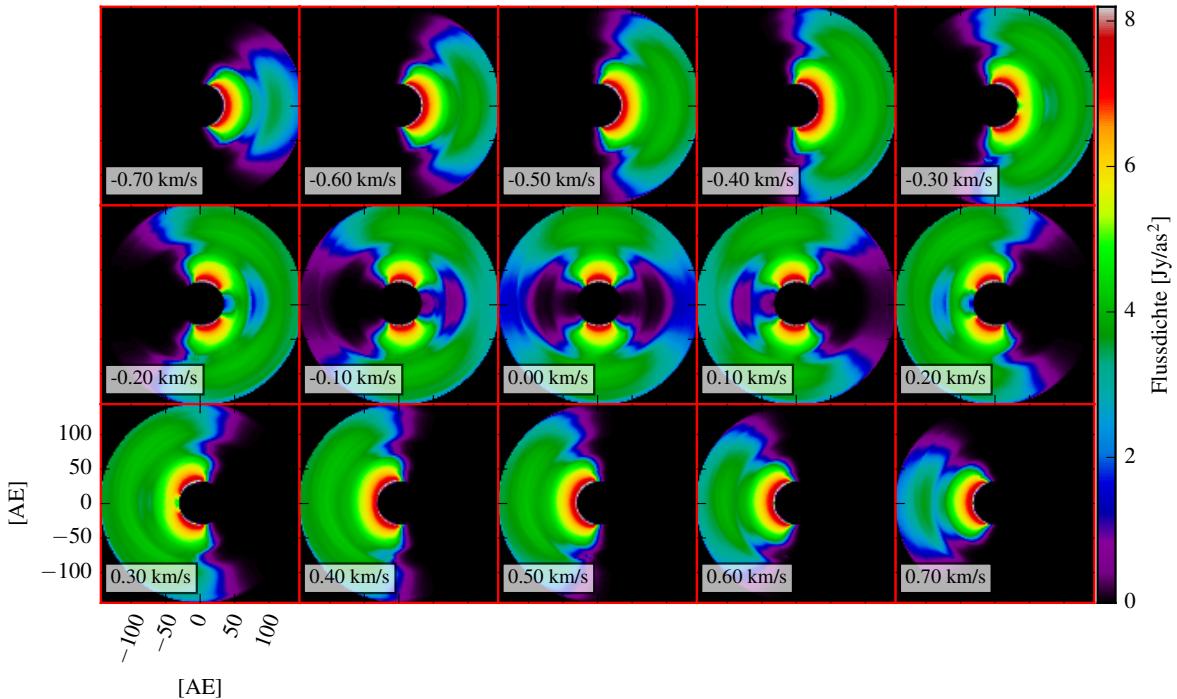


Abbildung 6.5 – Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten bei einer Scheibeninklination von 10° . Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der Scheibeninklination und der Doppler-verschobenen Linienemission erscheint die Scheibenlücke nicht als symmetrischer Ring wie im Fall der Kontinuumsstrahlung.

ren Scheibenbereichen nimmt zu, da aufgrund der heißeren Scheiben eine größere Anzahl von Molekülen ausreichend auf die relevanten Energieniveaus für die hier diskutierten Übergänge angeregt ist. Im Gegensatz zu der Situation in den äußereren Scheibenbereichen bewirkt die höhere Temperatur im Innersten der Scheibe, dass höhere Anregungszustände erreicht werden können, woraus konsequenterweise eine Depopulation der niedrigen Energieniveaus folgt. Dies ist gleichbedeutend damit, dass die niedrigen Linienübergänge, die in dieser Studie betrachtet werden, einen geringeren Fluss aus diesen innersten Scheibenregionen aufweisen, was im ersten Moment wenig intuitiv erscheint.

Des Weiteren ist die Masse des Herbig Ae-Sterns ca. 3.5 mal höher als die des T Tauri-Sterns, was eine höhere Kepler-Geschwindigkeit in einer vorgegebenen radialen Distanz vom Zentralstern nach sich zieht. Daraus ergibt sich für inklinierte Scheiben eine deutlich höhere Linienbreite der Doppler-verschobenen Linie als im Falle des T Tauri-Sterns. Folglich erscheinen, bei einem bestimmten Geschwindigkeitskanal (Bandbreiten von $\Delta v = 50$ m/s in dieser Studie), die Bereiche der Scheibe mit den dem Kanal entsprechenden Geschwindigkeiten präzise und klar definiert (vgl. Abbildung 6.8). Somit können, unter der Annahme derselben Scheiben für beide Vor-Hauptreihensterne, individuelle Scheibenregionen im Falle des massiveren Zentral-

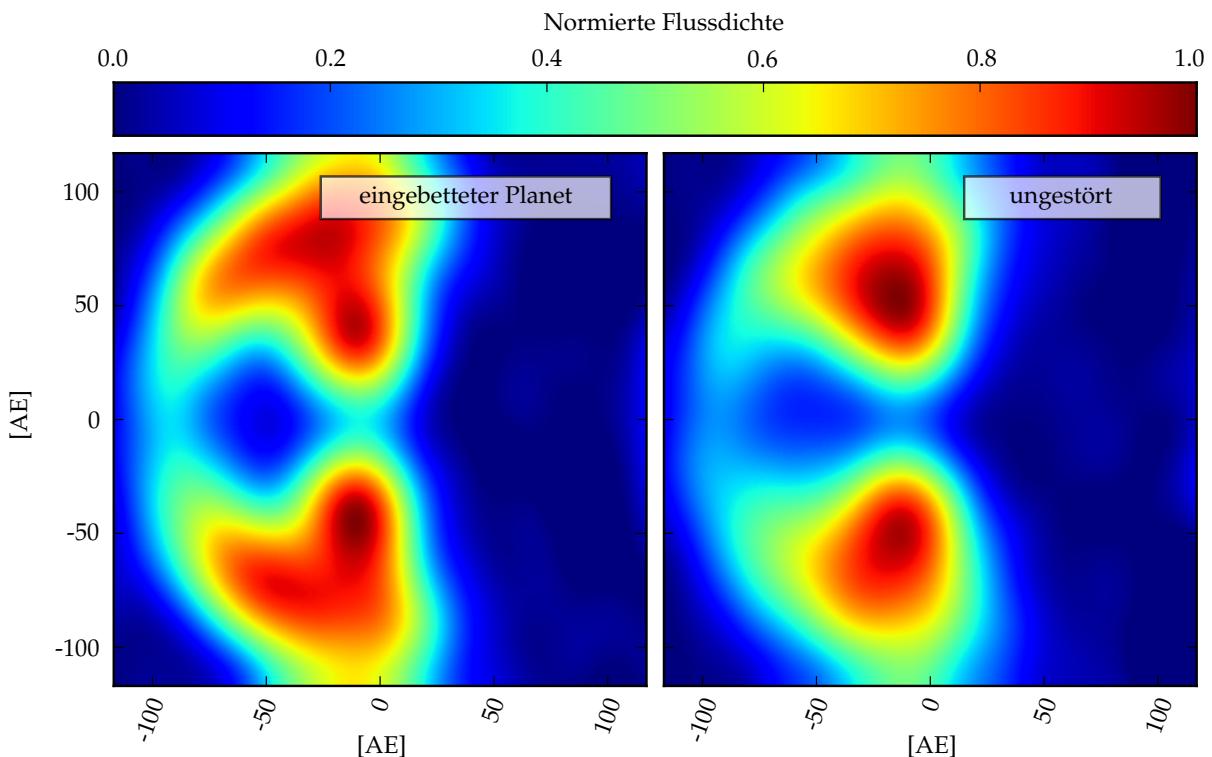


Abbildung 6.6 – Ideale HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten bei $v = 150 \text{ m/s}$. Beide Scheiben weisen eine Inklination zum Beobachter von 10° auf. Die räumlich aufgelösten Linienemissionen des gestörten (links) und ungestörten (rechts) Scheibenmodells weisen ähnliche Muster auf, die nicht eindeutig die Existenz einer Scheibenlücke beweisen.

sterns besser untersucht werden. Dies wiederum erhöht die Wahrscheinlichkeit eine Lücke zu entdecken. Dieser Effekt ist ein direktes Ergebnis aus der Abhängigkeit der Linienbreite von der kinetischen Temperatur (Gl. 4.18).

6.3.2 Algorithmus zur Nachweisbarkeit von Scheibenlücken

Im Folgenden folgt eine quantitative Auswertung, unter welchen Bedingungen sich Scheibenlücken in Moleküllinien nachweisen lassen. Dies umfasst die Scheibenmasse, Scheibenausdehnung, Wahl des Moleküls und Übergangs sowie den Einfluss der zentralen Strahlungsquelle. Dazu wird das Verfahren eine Lücke zu identifizieren und ihre Tiefe aus den einzelnen Geschwindigkeitskarten abzuleiten vorgestellt und beschrieben.

Die Vorgehensweise folgt im Ansatz derjenigen Prozedur, die in der Studie von Ruge u. a. [2013] für die Staubemission veröffentlicht ist.

Der Kontrast zwischen innerem bzw. äußerem Rand der Lücke sowie der Lücke selbst, wird mithilfe radialer Schnitte durch die simulierten Geschwindigkeitskarten abgeleitet. Die Bestimmung der Lückentiefe ist in Abbildung 6.9 illustriert. Um die Wahrscheinlichkeit einer fälschlichen Lückendetektion (z. B. ein lokales Minimum in der Flussdichte, hervorgerufen durch den in Abschnitt 6.3.1 diskutierten Inklinati-

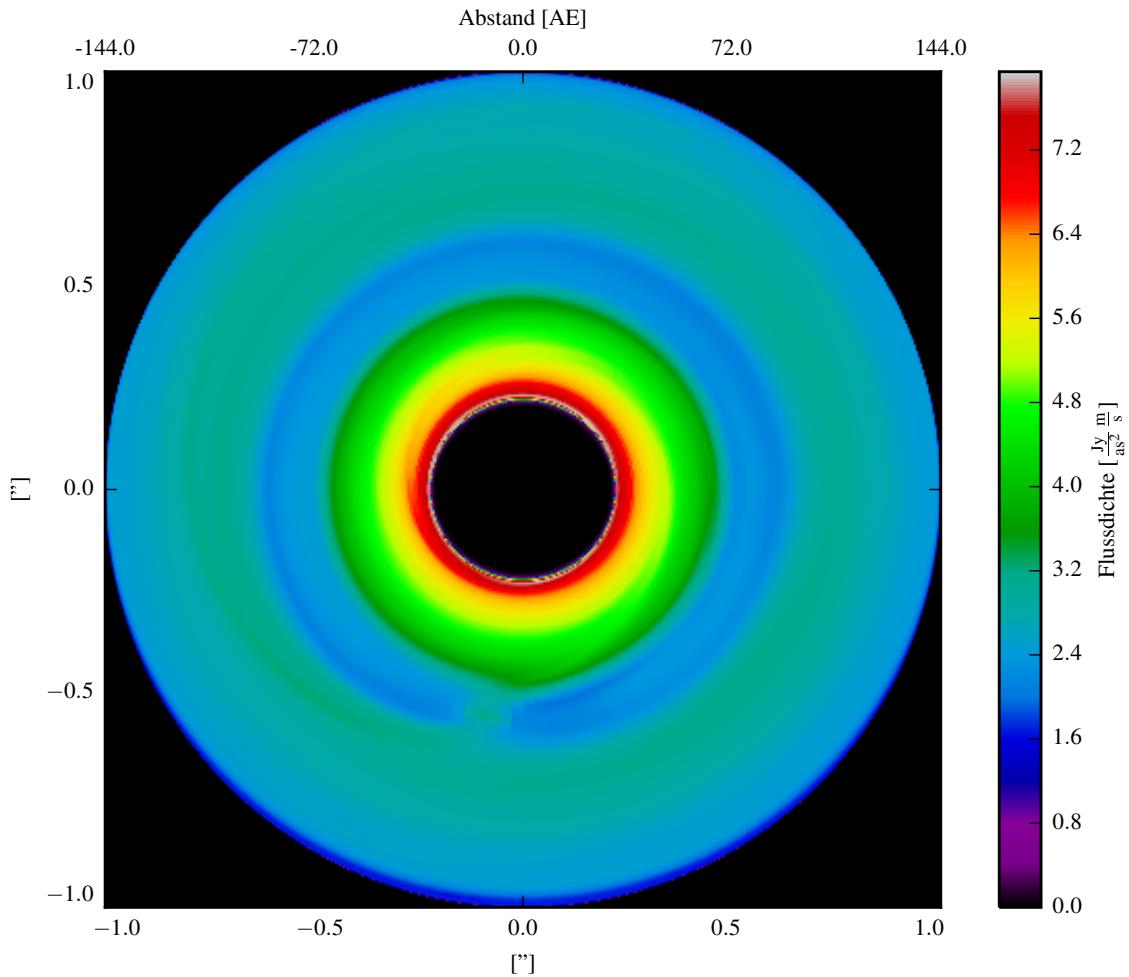


Abbildung 6.7 – $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeits-integrierte Flussdichte der Geschwindigkeitskarte aus Abb. 6.5. Aufgrund der Integration ist der Einfluss und damit das Muster des zugrunde liegenden Geschwindigkeitsfelds verschwunden.

onseffekt) zu minimieren, werden in der Analyse 64 unabhängige, radiale Schnitte berücksichtigt. Damit die Lücke in einer einzelnen Geschwindigkeitskarte als eindeutig detektiert gilt, muss in mehr als der Hälfte aller Schnitte eine Lücke in der Orbitalregion des Planeten nachweisbar sein. Sind es weniger, so wird weiter geprüft, ob die Schnitte, in denen eine potenzielle Lücke gefunden wurde, aufeinander folgen. Dies ist insbesondere im Fall der inklinierten Scheiben notwendig. Ist eine Lücke detektiert, so wird die größte gemessene Tiefe der einzelnen Schnitte als gesuchte Lückentiefe angenommen.

Der beschriebene Algorithmus wurde erfolgreich an den ungestörten Referenzmodellen getestet, um zu verifizieren, dass keine Substruktur der Linienemission fälschlicherweise als Lücke identifiziert wird. Allerdings muss an dieser Stelle betont werden, dass in dieser Studie ein außergewöhnlich großer Parameterraum betrachtet wird und ein extrem generalisierter Algorithmus notwendig ist, der alle Modelle analysiert. Als Konsequenz kann es sein, dass für einzelne reelle Beobachtungen bessere

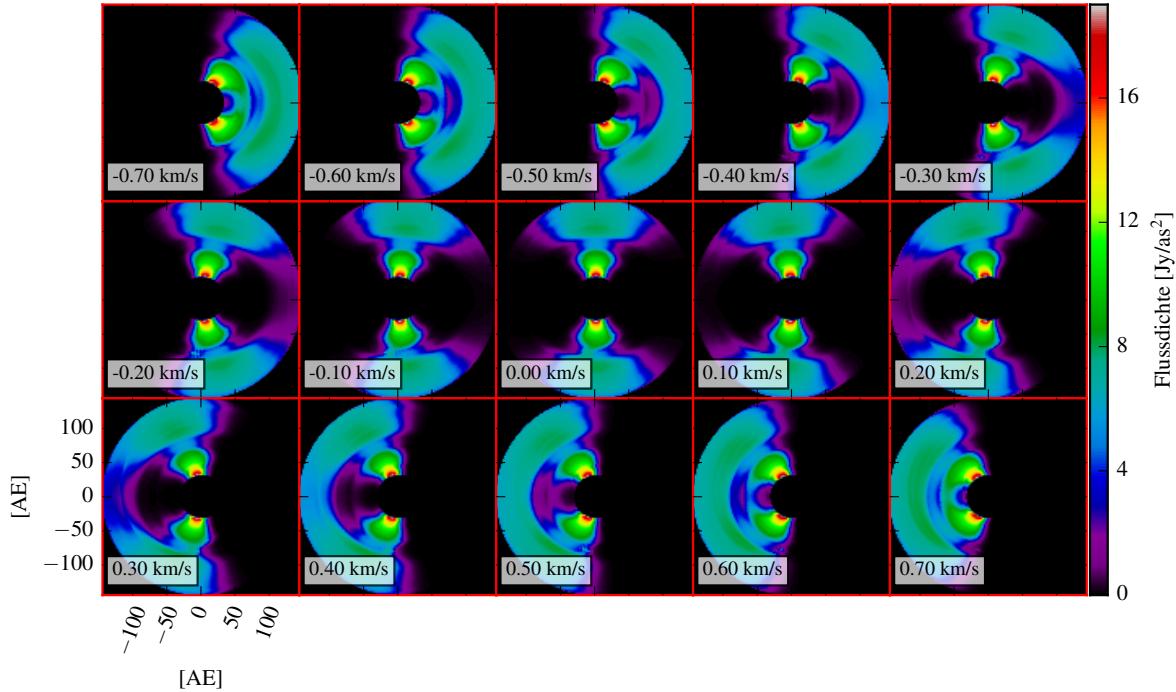


Abbildung 6.8 – Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen Herbig Ae-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten bei einer Scheibeninklination von 10° . Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE.

Ergebnisse erzielt werden, wenn der Algorithmus an die spezielle Beobachtung angepasst wird. Dabei sollte beispielsweise eine individuelle Anpassung zur Kompen-sation des Hintergrundrauschen oder der spärlichen uv-Abdeckung durchgeführt werden, da beide Effekte zu asymmetrischen Strukturen führen, die ein Algorithmus fälschlicherweise als echte Strukturen identifiziert.

6.3.3 Übersichtskarten im idealen Fall

In diesem Abschnitt wird die Machbarkeit, Scheibenlücken durch die Beobachtung ausgewählter Moleküllinien zu identifizieren, für alle betrachteten Scheibenkonfigu-rationen (siehe Tabelle 6.3) zusammengefasst. Dazu wird die Lückentiefe für alle 32 angenommenen Übergänge mithilfe des oben beschriebenen Algorithmus in den einzelnen, idealen Geschwindigkeitskarten bestimmt. Für jeden Übergang wird ebenso das erwartete Hintergrundrauschen (σ) mit dem *ALMA Sensitivity Calculator* (vgl. Ab-schnitt 6.3.4.1 und Tabelle 6.4) berechnet. Aufgrund der atmosphärischen Transmissi-on steigt σ in erster Näherung mit der Frequenz an. Für kürzere Wellenlängen oder analog höhere Molekülübergänge führt dies zu einer Verringerung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses. Um diesen Effekt zu berücksichtigen, wird für jeden in dieser Studie betrachteten Linienübergang die Lückentiefe berechnet und mit dem erwar-te-ten Wert für σ gewichtet. Daraus ergibt sich ein Kriterium, welches angibt, wie gut

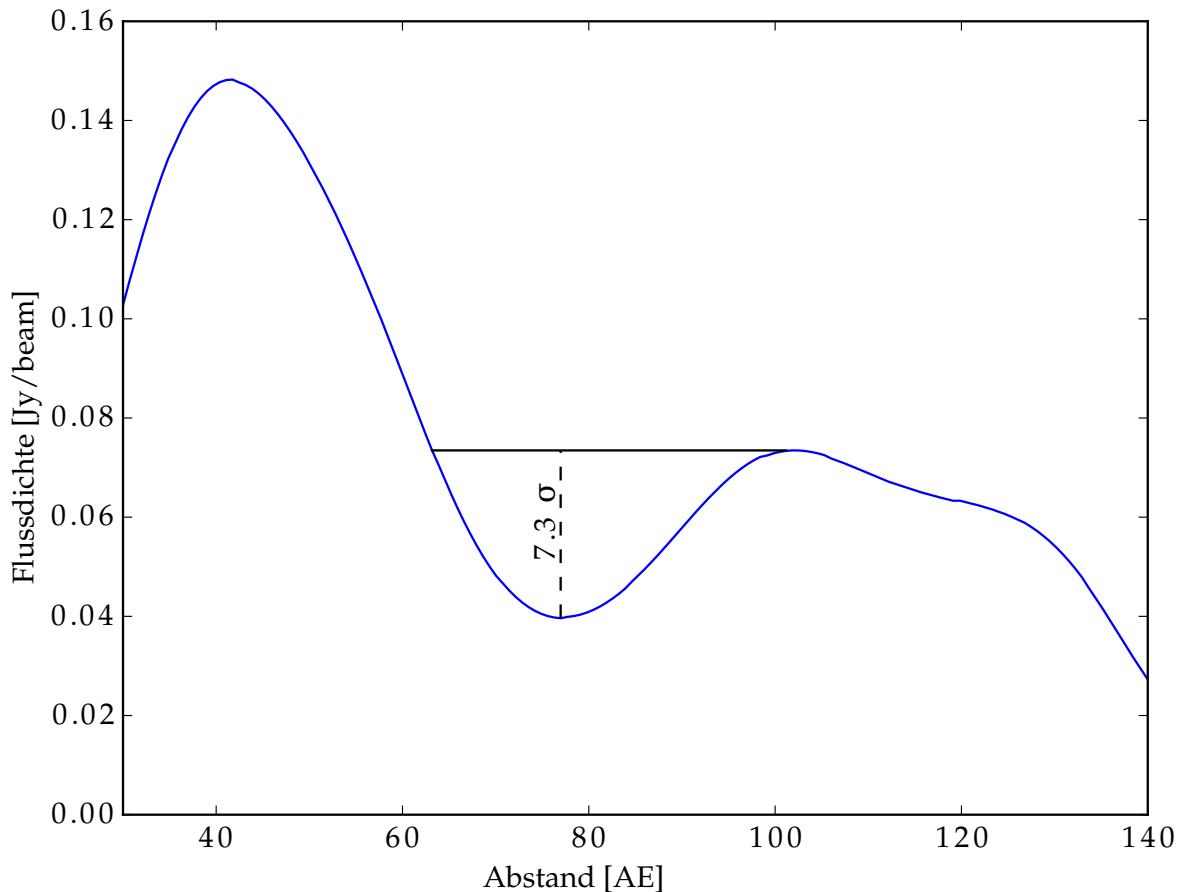


Abbildung 6.9 – Illustration der Methode um eine Scheibenlücke nachzuweisen. In blau ist ein radialer Schnitt durch die HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarte (Abb. 6.15, $v = 0.0 \text{ m/s}$). Eine Lücke gilt als eindeutig detektiert, wenn die Lückentiefe größer als das Dreifache des Rauschlevels des betrachteten Übergangs ist. Für diesen dargestellten Fall ist die Lücke mit einer Signifikanz von $\sim 7\sigma$ deutlich zu identifizieren.

einzelne Übergänge eine Lückendetektion mit ALMA erlauben. Diese Ergebnisse ermöglichen es, schon im Vorfeld diejenigen Übergänge auszuwählen, die am besten für die simulierten ALMA-Beobachtungen in Abschnitt 6.3.4 geeignet sind.

Die Abbildung 6.10 zeigt exemplarisch die Ergebnisse für eine Scheibenkonfiguration mit einem Außenradius von 144 AE und einer Scheibenmasse von $2.67 \cdot 10^{-3} \text{ M}_\odot$ um einen Herbig Ae-Stern. Sie zeigt die in jedem Geschwindigkeitskanal gemessene Lückentiefe für drei typische Übergänge. Die Ergebnisse legen dar, dass es mithilfe der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) und CS (7-6) Übergänge nicht möglich ist, die Lücke im jeweiligen Linienzentrum ($|v| < 200 \text{ m/s}$) zu detektieren. Beide Übergänge sind für diese Scheibenkonfiguration um die Übergangsfrequenz optisch dick und die Linienemission stammt aus der ungestörten Scheibenoberfläche. Nur in schmalen Geschwindigkeitsbereichen in den Linienflügeln, in denen die optische Tiefe im Vergleich zur Linienmitte reduziert ist, lässt sich die Scheibenlücke nachweisen. Insbesondere mit dem oft beobachteten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang ist es schwierig die Lücke eindeutig zu iden-

tifizieren, da dieser Übergang selbst in den Linienflügeln fast durchgehend nur die Scheibenoberfläche abbildet.

Im Gegensatz dazu erlaubt der optisch dünne $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergang eine Detektion der Lücke über einen breiten Geschwindigkeitsbereich ($|v| < 500 \text{ m/s}$) und sogar bei der Zentralfrequenz. Gleichwohl wird der höchste Wert der gewichteten Lückentiefe (also ein Maß für die beste Detektierbarkeit) durch den CS (7-6) Übergang bei $\pm 350 \text{ m/s}$ erreicht.

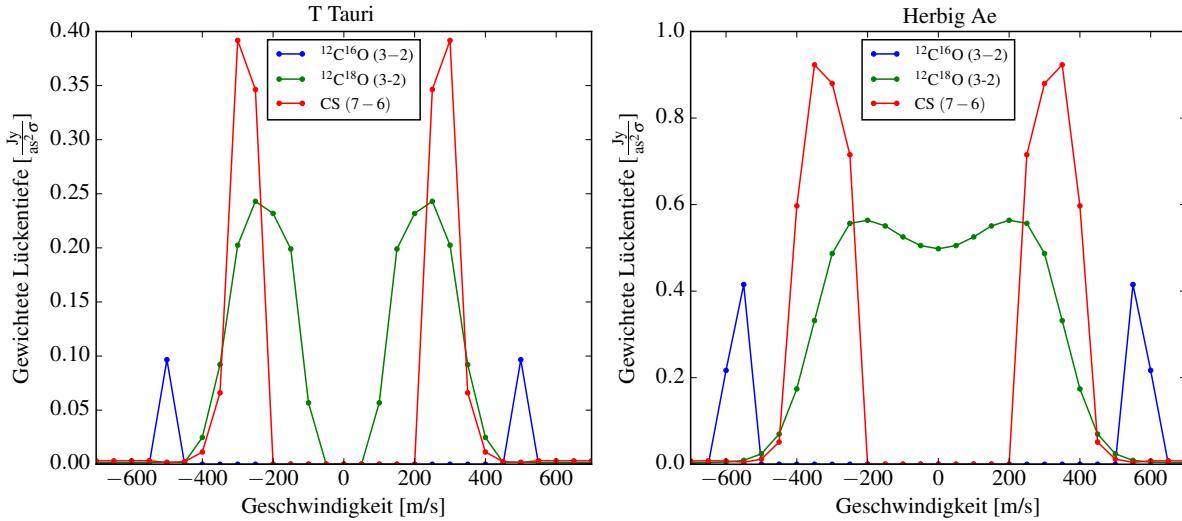


Abbildung 6.10 – σ -gewichtete, ideale Lückentiefe in Abhängigkeit der Geschwindigkeit. Die Lücke kann mit dem optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang (blau) nur in den Linienflügeln nachgewiesen werden (bei $v = \pm 700 \text{ m/s}$). Im Gegensatz dazu erlaubt der $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergang (grün) die Lücke über einen breiten Geschwindigkeitsbereich, im Herbig Ae-Fall auch im Linienzentrum, zu detektieren. Allerdings ergibt sich die signifikanteste Linientiefe für beide Sterne mit dem CS (7-6) Übergang bei $\pm 350 \text{ m/s}$.

Um sämtliche Ergebnisse zusammenzufassen und auswertbar zu machen, wird der Übergang gesucht, der die größte Lückentiefe für eine vorgegebene Scheibenkonfiguration liefert. Im Fall des zuvor dargestellten Beispiels (siehe Abb. 6.10) wäre dies der CS (7-6) Übergang. Die Ergebnisse werden in Form von Übersichtskarten dargestellt. Die resultierenden Karten für beide betrachteten Vor-Hauptreihensterne zeigen die Abbildungen 6.11 und 6.12, in die jeweils der für die jeweilige Scheibenkonfiguration (Masse, Ausdehnung) gefundene, beste Übergang eingetragen ist. Die vollständigen Übersichtskarten, die die Lückentiefen aller 32 in dieser Studie betrachteten Rotationsübergänge enthalten, können im Anhang A.7 eingesehen werden.

Wie bereits im Abschnitt 6.3.1 darauf hingewiesen wurde, ist die Wahl des passenden Moleküls in erster Linie von der Masse bzw. Dichte des Scheibenmodells abhängig. Daher ist Kohlenstoffmonoxid das vielversprechendste Molekül, um Lücken in massearmen Scheiben ($\sim 10^{-4}\text{-}10^{-5} M_{\odot}$) zu detektieren. Die Lücke kann entweder im Linienzentrum (bei den geringsten Scheibenmassen) oder in den Linienflügeln (für mittlere Scheibenmassen) detektiert werden. In vielen Scheibenkonfigurationen ist die Flussdichte und damit die Linientiefe in den Linienflügeln sogar höher als die

Linientiefe, die mit anderen Molekülen erreicht werden kann.

Für die im Rahmen dieser Studie betrachteten Scheiben mittlerer Massen ($\sim 10^{-2}$ - $10^{-3} M_{\odot}$) ist die Detektion von Lücken besonders schwierig. In diesen Fällen ist $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ optisch dick für beinahe alle betrachteten Scheibenkonfigurationen, sogar in den Linienflügeln. Daher sind die Übergänge von weniger oft vorkommenden Molekülen wie HCO^+ , HCN, oder CS besser für die Lückendetektion geeignet. Allerdings ist der Nettofluss dieser Moleküllinien aufgrund der geringen Häufigkeiten sehr niedrig. Daher ist die gewichtete Lückentiefe, die die Flussdichte mit dem Hintergrundrauschen ins Verhältnis setzt, oftmals zu gering, um eine Lücke zweifelsfrei zu identifizieren. Die massereichsten in dieser Arbeit betrachteten Scheiben ($\sim 10^{-1} M_{\odot}$) zeigen bei keinem Übergang ein vertrauenswürdiges Anzeichen einer Lücke. Diese Scheibenlücken können am besten außerhalb der Linienemission im Staubkontinuum nachgewiesen werden. Es zeigt sich, dass dies sogar mit der in dieser Studie betrachteten geringen Bandbreite von $\Delta v = 50 \text{ m/s}$ möglich ist. Daher sind diese Fälle in den Abbildung 6.11 und 6.12 mit *Staub* markiert.

Der Vergleich der Ergebnisse der beiden Vor-Hauptreihensterne zeigt ein qualitativ gleiches Verhalten. Geringe Unterschiede, welche Molekülübergänge die höchste Wahrscheinlichkeit liefern eine Lücke zu detektieren, sind durch die unterschiedlichen stellaren Eigenschaften wie die Sternmasse und die Leuchtkraft (vgl. Abschnitt 6.3.1 für eine Diskussion) bedingt. Aufgrund der unterschiedlichen Anregungszustände ermöglicht zum Beispiel das $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Molekül eine Lückendetektion auch bei Scheiben mit einer Gesamtmasse von $\sim 10^{-4} M_{\odot}$.

Daher bekräftigen diese Ergebnisse die Machbarkeit der Lückendetektion unter der Verwendung molekularer Linien. Allerdings liefert diese Methode nur bei protoplanetaren Scheiben mit einer geringen Masse oder Scheiben mit besonders großen inneren Löchern (z. B. Übergangsscheiben oder zirkumbinäre Scheiben) wirklich aussagekräftige Ergebnisse.

6.3.4 Simulierte ALMA-Beobachtungen

6.3.4.1 Der ALMA-Simulations-Aufbau

Konfiguration	max. Basislinie [m]
9	922
11	1 038
14	1 622
17	2 297
20	3 693
28	16 323

Tabelle 6.5 – Auflistung der verwendeten ALMA-Konfigurationen

Um auf der Grundlage der idealen Geschwindigkeitskarten ALMA-Beobachtungen zu simulieren, wird das CASA-Programm verwendet. Die Funktionsweise dieser Software und die grundlegenden Einstellungen sind in Abschnitt 2.3.2 dargestellt.

Insgesamt werden sechs mittlere und ausgedehnte ALMA-Konfigurationen (entsprechen maximalen Basislinien von ca. 0.9 km bis 16 km, siehe Tabelle 6.5) unter der Verwendung von 50 Antennen, bei einer totalen Beobachtungszeit von drei Stunden, einer Ob-

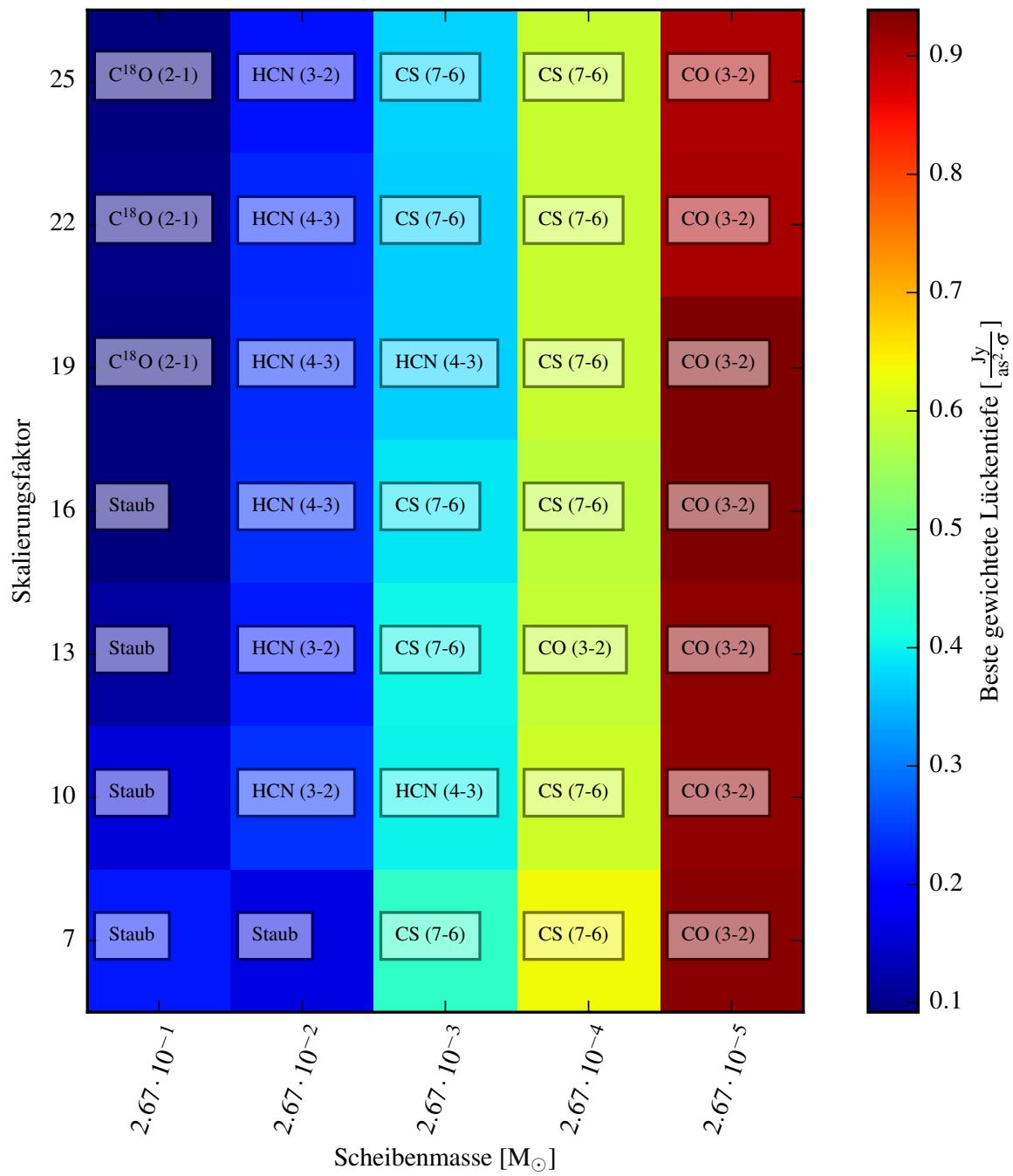


Abbildung 6.11 – Übersichtskarten zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken im idealen Fall. Es werden alle 32 betrachteten Übergänge ausgewertet und für jede Scheibenkonfiguration (Masse, Ausdehnung) der Übergang bestimmt, bei dem die Lücke am signifikantesten erscheint. Links sind die Ergebnisse mit dem T Tauri-Stern und rechts mit dem Herbig Ae-Stern dargestellt. Für die massereichsten Scheiben sind alle Übergänge optisch dick und die Linienemission stammt nur aus der ungestörten Scheibenoberfläche. Die Lücken dieser Scheiben lassen sich daher besser durch Kontinuum-Beobachtungen im (Sub-)Millimeter nachweisen.

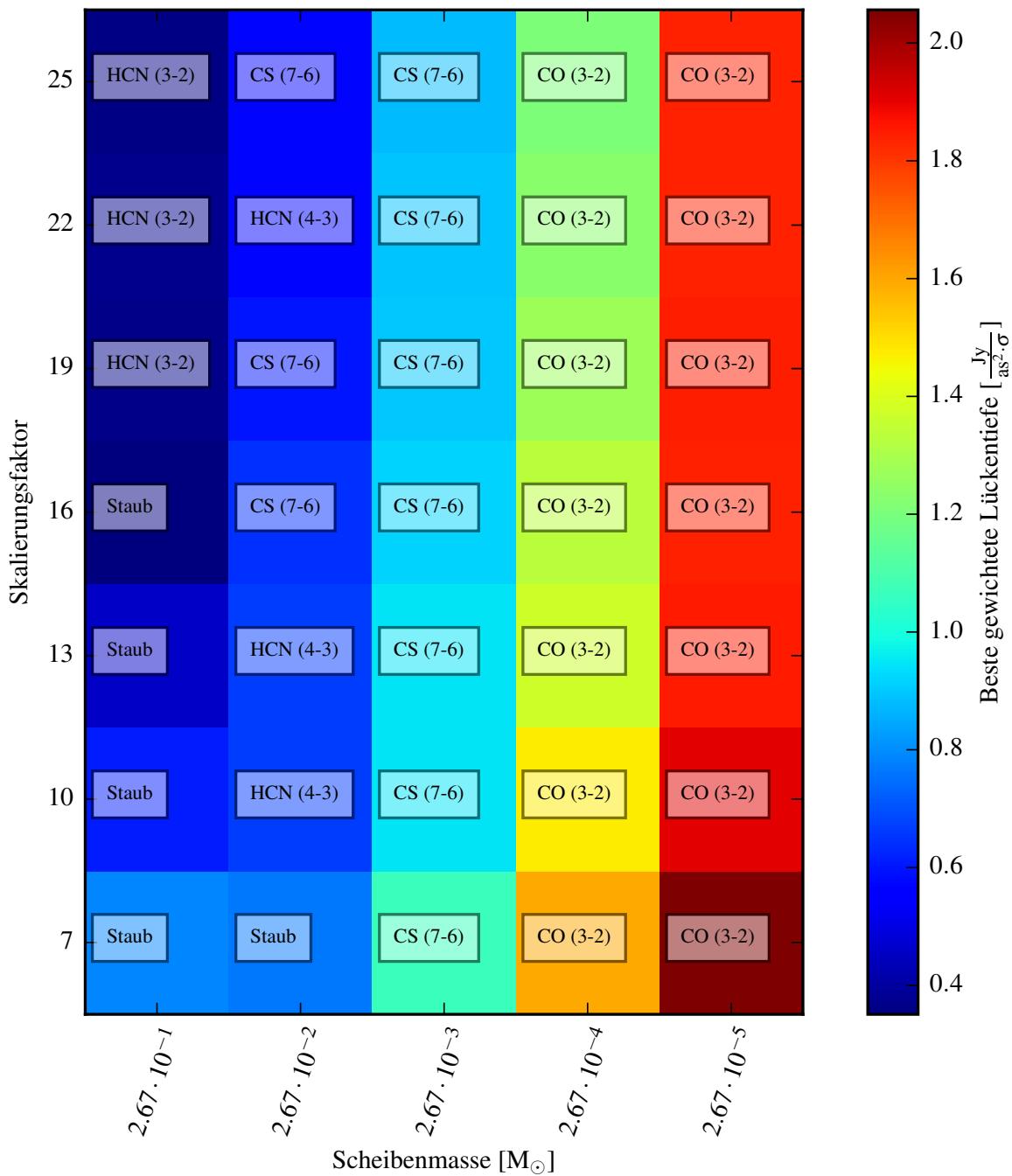


Abbildung 6.12 – Übersichtskarten analog zu Abbildung 6.11 nur mit dem Herbig Ae-Stern als zentrale Strahlungsquelle.

jeckdistanz von 140 pc und den Himmelskoordinaten des *Butterfly*-Sterns⁹ [Wolf 2003a; Gräfe u. a. 2013] betrachtet. Dieses Objekt steht repräsentativ für junge, stellare Objekte in der Taurus-Auriga Sternentstehungsregion. Die Eigenschaften der betrachteten Moleküle und das erwartete Rauschlevel σ sind in der Tabelle 6.4 zusammengefasst. Unter Berücksichtigung der Ergebnisse aus Abschnitt 6.3.2 werden die fünf Molekülübergänge ausgewählt, die die höchste Wahrscheinlichkeit zur Liniendetektion bieten. Diese sind $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2), $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2), CS (7-6), HCO^+ (4-3), und HCN (4-3). Zusätzlich bieten die ähnlichen Frequenzen der betrachteten Rotationsübergänge bei ca. 345 GHz (ALMA Band 7, vgl. Tabelle 6.4) eine zuverlässige Vergleichbarkeit der unterschiedlichen Moleküle. Weiter liefert diese Wahl einen guten Kompromiss zwischen räumlicher Auflösung (höhere Frequenzen) und einer guten atmosphärischen Transmission¹⁰ (niedrigere Frequenzen).

6.3.4.2 Simulierte Linienbeobachtungen

In den Abbildungen 6.13 und 6.14 ist exemplarisch das in den Abbildungen 6.2 und 6.5 für den idealen Fall vorgestellte Scheibenmodell dargestellt, wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (~ 1.6 km maximale Basislinie) in drei Stunden beobachtet werden kann, wenn die Scheibe in Draufsicht und mit einer geringen Inklination von 10° zum Beobachter orientiert ist.

Allgemein resultieren kompaktere max. Basislinien in höheren Flussdichten und führen daher zu höheren Signal-zu-Rausch-Verhältnissen, während größere max. Basislinien bessere räumliche Auflösung auf Kosten eines verschlechterten Signal-zu-Rausch-Verhältnisses bieten. Daher muss im Einzelfall entschieden werden, welche max. Basislinie/Konfiguration benötigt wird, um Scheibenlücken bei einer vorgegebenen Scheibenausdehnung räumlich auflösen zu können und gleichzeitig ein signifikantes Signal-zu-Rausch-Verhältnis zu gewährleisten.

Für die ausgedehntesten ($R_{\text{innen}} \sim 45$ AE, $R_{\text{außen}} \sim 200$ AE) in dieser Studie betrachteten Scheibenkonfigurationen sind maximale Basislinien von etwa 1 km ausreichend, um die Lücke in diesen Scheiben zu identifizieren. Im Gegensatz dazu sind für die kompaktesten Scheiben ($R_{\text{innen}} \sim 14$ AE, $R_{\text{außen}} \sim 63$ AE) im Parameterraum höhere Auflösungen und somit längere Basislinien erforderlich. Für diese Scheiben ist eine eindeutige Lückendetektion unter der Verwendung mittlerer max. Basislinien von etwa 1-3 km erfolgversprechend.

Es zeigt sich, dass die längsten betrachteten max. Basislinien für die hier diskutierten Scheibenausdehnungen nicht erforderlich bzw. sogar von Nachteil sind und eine Identifikation der Lücken aufgrund des niedrigen Signal-zu-Rausch-Verhältnisses nicht möglich ist. Des Weiteren lässt sich in den simulierten ALMA-Geschwindigkeitskarten erkennen, dass viele der kleineren Signaturen der Planet-Scheibe-Wechselwirkung (innere und äußere Spiralarme und azimutale Scheibeninhomogenitäten) aufgrund der Faltung mit der PSF (vgl. Abschnitt 2.2) nicht mehr nachweisbar sind, bzw. durch die nicht vollständige uv-Abdeckung und die numerische Rückfaltung geglättet werden.

⁹ $\alpha = 04^\text{h}33^\text{m}17^\text{s}$, $\delta = +22^\circ53'20''$

¹⁰ siehe <https://almascience.eso.org/about-alma/weather/atmosphere-model>

tet werden. Für das in den Abbildungen 6.13 und 6.14 dargestellte Scheibenmodell und für die meisten der ausgedehnteren Modelle, kann die Scheibenlücke in beiden Inklinationsfällen identifiziert werden, indem eine max. Basislinie von ~ 1.6 km (ALMA-Konfiguration 14) verwendet wird.

Für dasselbe Scheibenmodell und dieselbe ALMA-Konfiguration ist in Abbildung

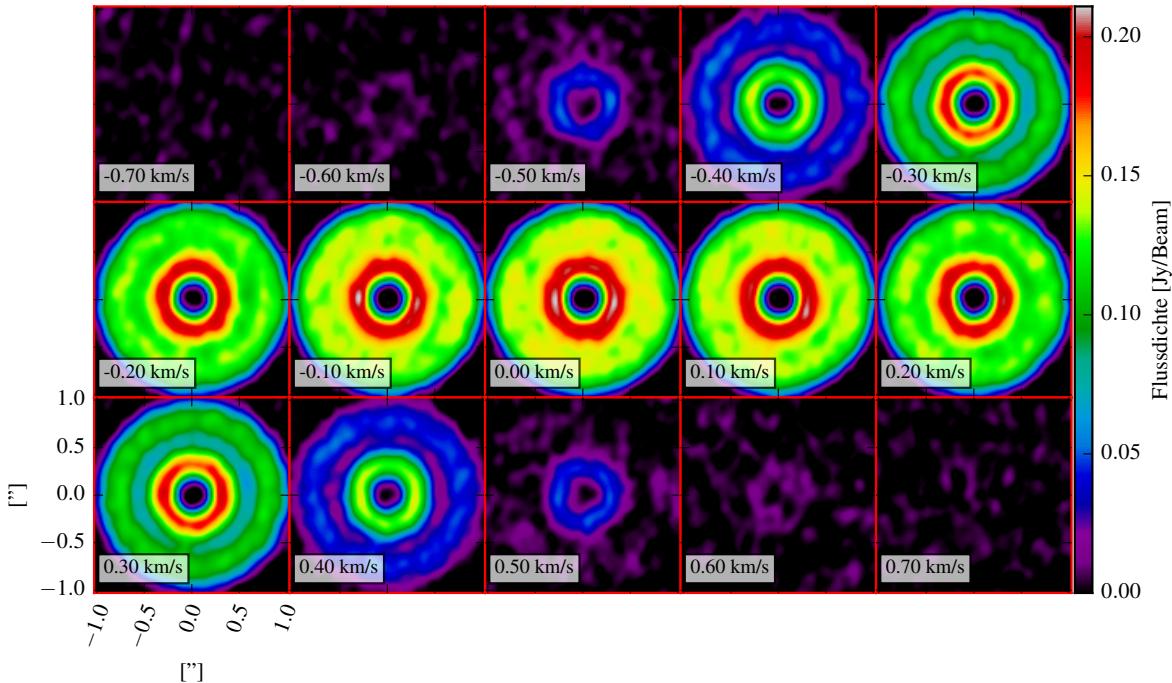


Abbildung 6.13 – $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Im Vergleich mit den idealen Geschwindigkeitskarten sind komplexe Scheibenstrukturen aufgrund der Faltung verschwunden. Trotzdem kann die Lücke deutlich in den Linienflügeln ($v = \pm 300$ m/s) nachgewiesen werden.

6.15 der HCO^+ (4-3) Linienübergang dargestellt. Auch hier zeigen sich wieder die Erkenntnisse, die schon für den idealen Fall abgeleitet wurden (Abschnitt 6.3.1). HCO^+ ist weniger häufig in der Scheibe vorhanden als $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, weshalb die Linie optisch weniger dick ist. Aus diesem Grund können tiefergelegene Scheibenregionen beobachtet werden, die vom Planeten mehr gestört sind als die Scheibenoberfläche und die Lücke erscheint ausgeprägter. Demgegenüber ist der Linienfluss im Vergleich zur simulierten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Linie desselben Modells um ca. $\sim 35\%$ geringer.

6.3.4.3 Ergebnisse der Lückendetektion

Die Hauptintention dieser Studie ist es zu untersuchen, unter welchen Bedingungen Scheibenlücken mithilfe von Moleküllinlien mit ALMA nachgewiesen werden können. Um dies für einen großen Umfang von Scheibenmodellen möglich zu machen,

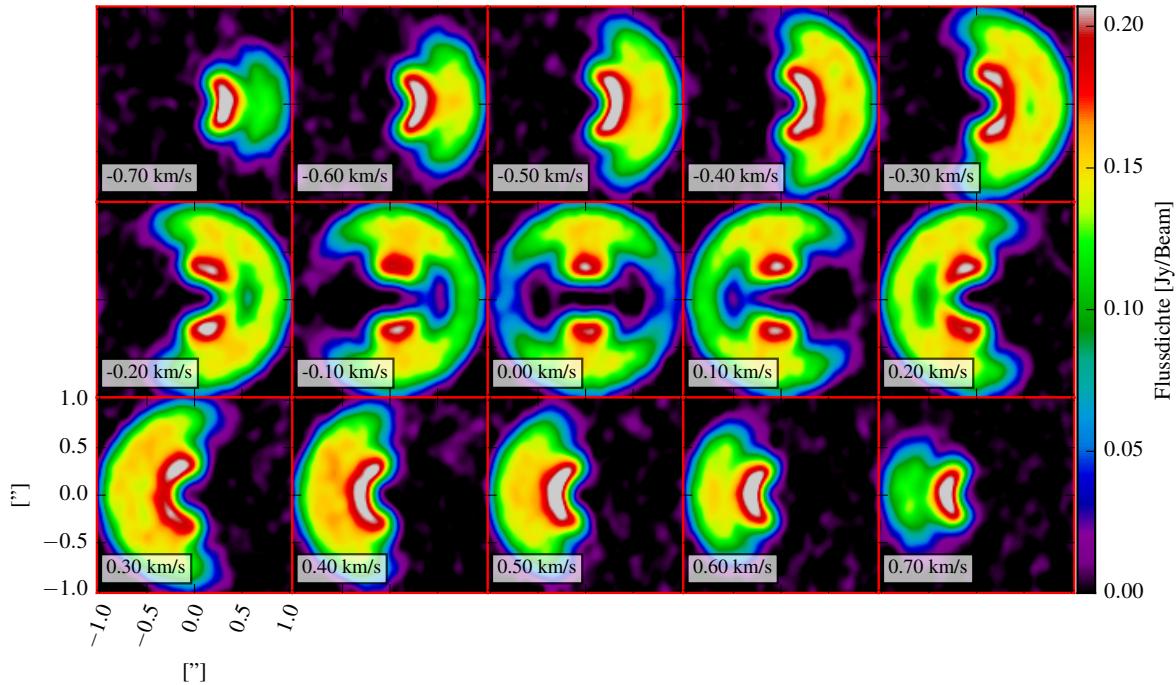


Abbildung 6.14 – $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE und die Scheibeninklination 10° .

wird ein allgemeingültiges Kriterium für eine quantitative Messung der Lückentiefe in den simulierten ALMA-Geschwindigkeitskarten definiert. Hierzu wird derselbe Algorithmus verwendet, wie er auch schon im Falle der idealen Karten (vgl. Abschnitt 6.3.2) erfolgreich verwendet wurde. Die resultierende Lückentiefe ist in Einheiten des Rauschlevels σ gegeben, um die Signifikanz der Lückendetektion zu verdeutlichen. Nur wenn die Tiefe der Lücke größer ist als das Dreifache des Rauschlevels σ , wird die Lücke als eindeutig detektiert betrachtet.

Zunächst wird gezeigt, dass der optische Tiefeneffekt (vgl. Abschnitt 6.3.1 für eine Diskussion im Idealfall) einen direkten Beobachtungseinfluss hat. Wie im Idealfall gezeigt wurde, ist die Wahl des Moleküls für eine vorgegebene Scheibenmasse und Scheibenausdehnung am wichtigsten für eine eindeutige Identifizierung der Lücken. In Abbildung 6.16 ist die Lückentiefe für dieselben Übergänge für den T Tauri- und den Herbig Ae-Stern wie zuvor in Abbildung 6.10 dargestellt, allerdings für eine simulierte ALMA-Beobachtung unter der Verwendung einer max. Basislinie von ca. 1.6 km.

Beide Ergebnisse sind qualitativ sehr gut vergleichbar, da die Lückentiefe im Idealfall denselben Trend wie die simulierten ALMA-Beobachtungen zeigen. Auch hier zeigt sich wieder die beschriebene Problematik, wenn $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) als Lückenindikator verwendet wird. Im Fall des Herbig Ae-Sterns (Abbildung 6.10 rechts) lässt sich die Lücke nur in den Linienflügeln nachweisen. Es ergibt sich eine maximale Lückentiefe von ca. 9σ .

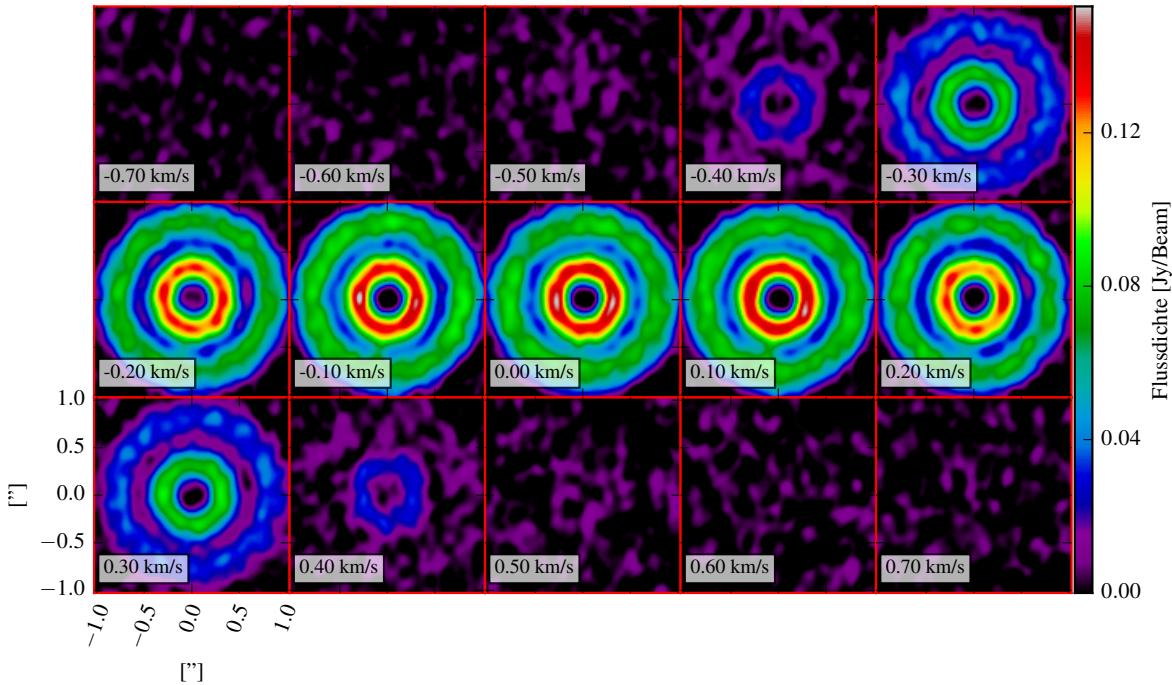


Abbildung 6.15 – HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Verglichen mit der simulierten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Beobachtung, ist die Flussdichte aufgrund der niedrigeren relativen Häufigkeit von HCO^+ um ca. 35 % geringer. Trotzdem ist die Lücke selbst im Linienzentrum eindeutig nachweisbar.

Im Kontrast dazu erlaubt der $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergang selbst im Linienzentrum eine Detektion der Scheibenlücke, wobei die Lückentiefe mit ca. $14\text{-}15 \sigma$ deutlich signifikanter ist. Wie zuvor im idealen Fall identifiziert der CS (7-6) Übergang die Lücke am deutlichsten, auch wenn die Emission der Linie nahe der Zentralfrequenz nur aus den obersten, ungestörten Scheibenschichten stammt und die Lücke daher im Linienzentrum nicht nachweisbar ist. Die resultierende Lückentiefe in den Linienflügeln bei $\pm 350 \text{ m/s}$ beträgt etwa 25σ .

Zum Schluss sind in den Abbildungen 6.17 und 6.18 sämtliche Ergebnisse in den Übersichtskarten für die beiden Vor-Hauptreihensterne (T Tauri, Herbig Ae) zusammengefasst. Dabei entspricht eine Zeile jeweils einem Molekülübergang und die Spalten geben die verwendete ALMA-Konfiguration an.

Wie bereits angesprochen, führen kompakte ALMA-Konfigurationen (9, 11) zu einem höheren Signal-zu-Rausch-Verhältnis auf Kosten der räumlichen Auflösung. Daraus ergibt sich, dass unter Verwendung der kompaktesten max. Basislinien ($\sim 922 \text{ m}$) Lücken nur für die am weitesten ausgedehnten Modelle (z. B. Scheibenmodelle mit $R_{\text{äußen}} = 255 \text{ AE}$) zu identifizieren sind. Werden längere max. Basislinien (höhere räumliche Auflösung) im Bereich von $\sim 1.6 \text{ km} - 2.3 \text{ km}$ betrachtet, ist es auch möglich, Lücken für kompaktere Modelle mit $\sigma > 3$ zu identifizieren. Mittlere max. Ba-

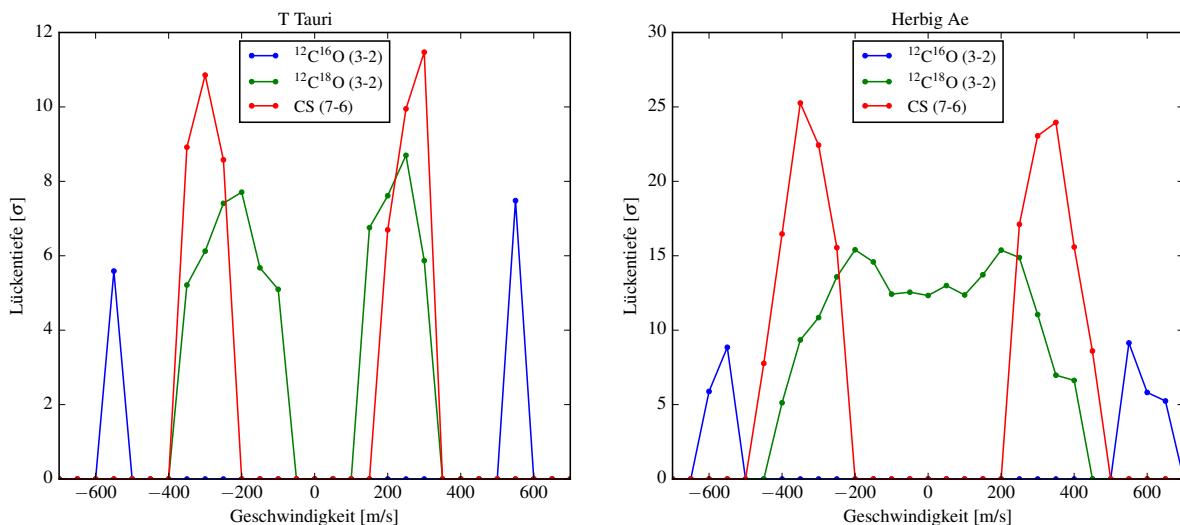


Abbildung 6.16 – Aus den simulierten ALMA-Karten abgeleitete Lückentiefe in Einheiten von σ in Abhängigkeit der Geschwindigkeit (vgl. Abb. 6.10 für den idealen Fall). Die signifikanteste Linientiefe von $\sim 25 \sigma$ wird für den Herbig Ae-Stern (rechts) mit dem CS (7-6) Übergang bei $\pm 350 \text{ m/s}$ und $\sim 11 \sigma$ für den T Tauri-Stern (links) erreicht.

sislinien (z. B. Konfiguration 11-14, $\sim 1.0 - 1.6 \text{ km}$) ermöglichen es potenziell Lücken für eine große Bandbreite von in dieser Studie betrachteten Modellen zu finden.

Der Vergleich zwischen den betrachteten Molekülen zeigt, dass CS, HCN und HCO^+ die Lückendetektion sogar für Scheiben mit mittlerer Masse ($\sim 10^{-3} \text{ M}_\odot$) erlauben, während $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ zu versagen scheint. Wie bereits in Abschnitt 6.2.2 diskutiert, kann aufgrund der optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Linie nur die Oberfläche der Scheiben beobachtet werden, die kaum durch die Planet-Scheibe-Interaktion gestört ist. Im Gegensatz dazu ist die Scheibenoberfläche für Moleküllinien mit geringerer Häufigkeit, sogar bei massereicheren Scheiben noch optisch dünn. Besonders die CS- und HCN-Moleküle haben sich als gute Kandidaten für die Lückendetektion im Massenbereich von $\sim 10^{-3} \text{ M}_\odot$ bis 10^{-4} M_\odot erwiesen.

Für noch massivere Scheiben ($M_{\text{Scheibe}} \geq 10^{-2} \text{ M}_\odot$) ist das $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Isotopolog $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ ein adäquater Kandidat. Trotzdem sollten Lücken von solch massereichen Scheiben, aufgrund des resultierenden niedrigen Linienflusses, im Kontinuum beobachtet werden. Wird von einem typischen Gas-zu-Staub-Verhältnis von 100 : 1 ausgegangen, so ergibt sich, dass diese Scheiben im (Sub-)Millimeter-Wellenlängenbereich in dem ALMA operiert, in der Lückenregion immer noch optisch dünn sind [vgl. auch Ruge u. a. 2013].

Zuletzt zeigt sich, dass aufgrund der angenommenen Beobachtungszeit von drei Stunden die langen max. Basislinien ($b > \sim 4 \text{ km}$) der ALMA-Konfigurationen 20 und 28, aufgrund des niedrigen intrinsischen Flusses sowie der inadäquaten uv-Abdeckung, nicht dazu geeignet sind, um die in dieser Studie betrachteten Scheibenlücken aufzuspüren.

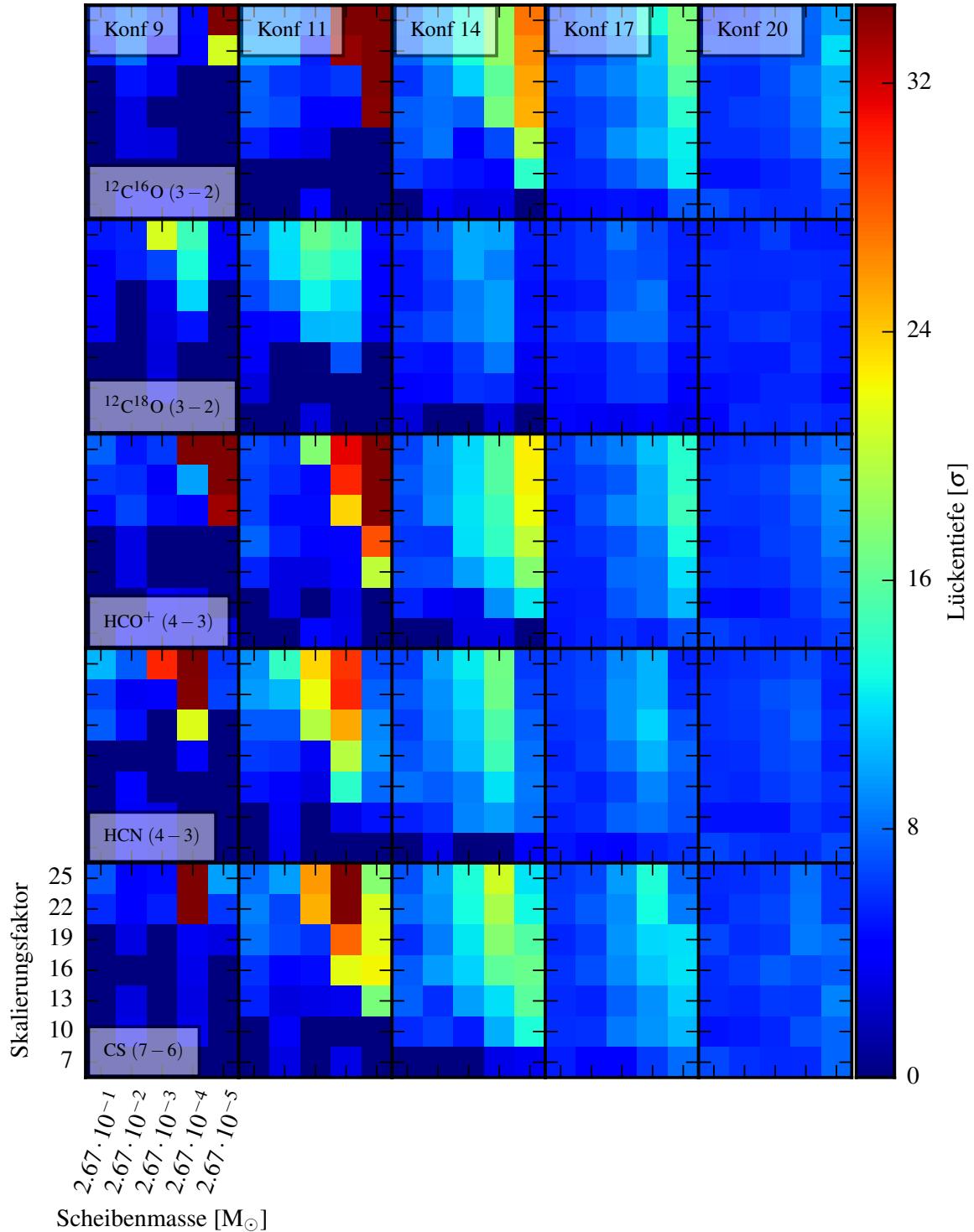


Abbildung 6.17 – Übersichtskarten zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken mit Moleküllinlien für den T Tauri-Fall. Jede Spalte steht für eine ALMA-Konfiguration und jede Reihe repräsentiert einen der fünf betrachteten Übergänge. Die inneren Achsen beschreiben die Scheibenausdehnung mit Skalierungsfaktor k und die Scheibenmasse. Die Lückentiefe ist durch die Farbskalierung in Einheiten des Hintergrundrauschens σ gegeben. Die Ergebnisse zeigen, dass die Lückendetektion auf massearme Scheiben ($M_{\text{Scheibe}} \leq 10^{-3}$) beschränkt ist und folgen denen des idealen Falls.

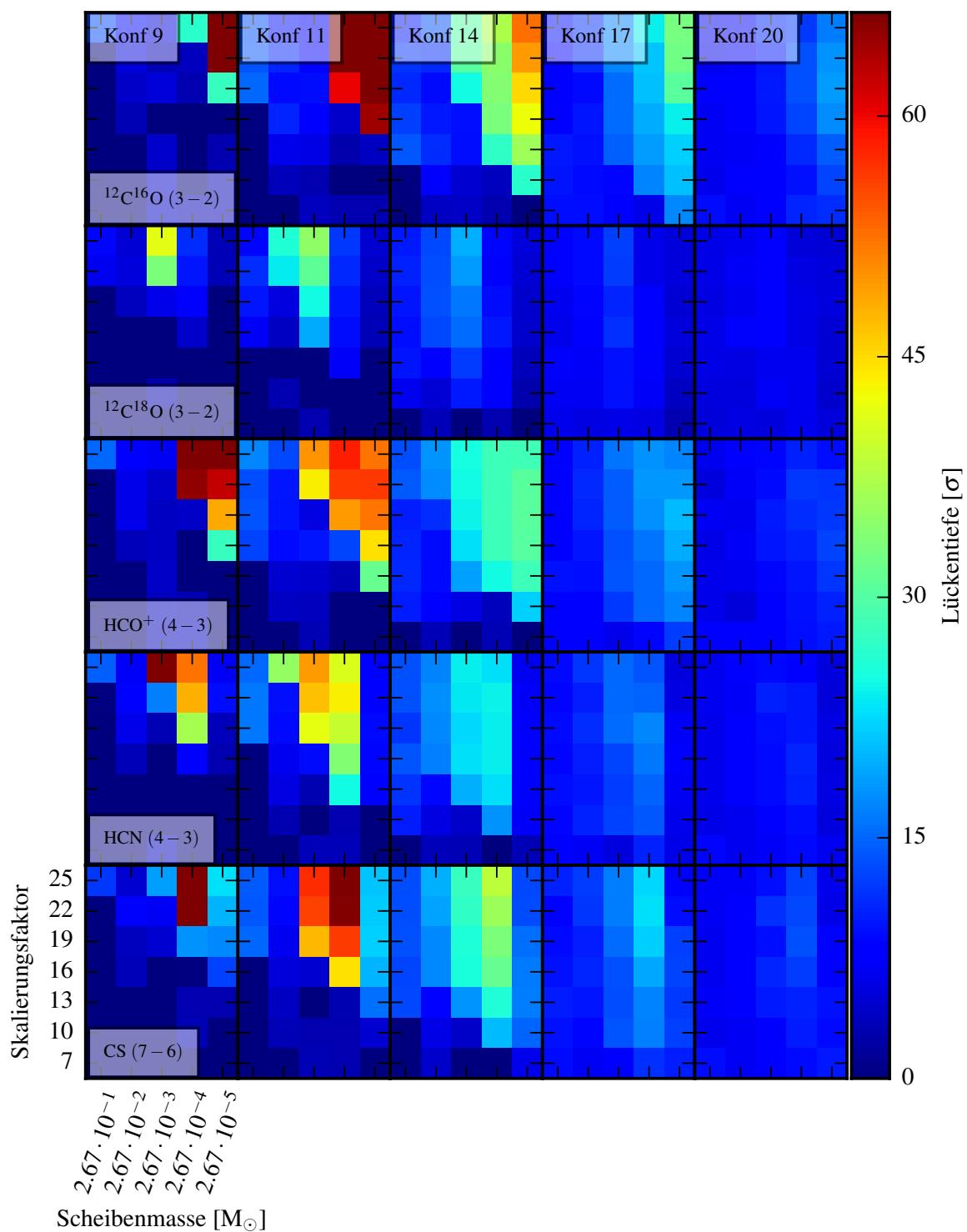


Abbildung 6.18 – In Analogie zu Abbildung 6.17 nur mit einem Herbig Ae-Stern als zentrale Stahlungsquelle. Die geringen qualitativen Unterschiede lassen sich auf die deutlich höhere Leuchtkraft und damit höhere Scheibentemperatur zurückführen (vgl. Abschnitt 6.3.1)

6.4 FAZIT

Das Ziel dieses Kapitels als Teil dieser Arbeit ist die Untersuchung, wie sich Planeten-induzierte Scheibenstrukturen auf die beobachtbare Molekülstrahlung auswirken, wobei ein besonderes Augenmerk auf planetare Scheibenlücken gelegt wurde. Weiterführend wurde der Frage nachgegangen, unter welchen Bedingungen sich diese Lücken im idealen Fall und im Fall simulierter ALMA-Linienbeobachtungen nachweisen lassen.

Daher wurden auf der Basis von 3D Hydrodynamik-Simulationen, die mit dem PLUTO-Programm durchgeführt wurden, synthetische Geschwindigkeitskarten für fünf Moleküle ($^{12}\text{C}^{16}\text{O}$, $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, HCO^+ , HCN, und CS), die bereits in protoplanetaren Scheiben nachgewiesen werden konnten, und insgesamt 32 Rotationsübergänge simuliert. Zu diesem Zweck wurde das in dieser Arbeit vorgestellte, neu entwickelte Linienstrahlungstransferprogramm *Mol3D* verwendet (siehe Teil II). Die resultierenden Geschwindigkeitskarten wurden im Anschluss als Eingabe an das CASA-Programm weitergegeben, um realistische ALMA-Beobachtungen zu simulieren.

Im Folgenden sind die Ergebnisse dieser Studie zusammengefasst:

- Das aufgrund des Keplerschen Geschwindigkeitsfelds entstehende Emissionsmuster inklinierter Scheiben maskiert effektiv die Planeten-induzierten Strukturen. In diesen Fällen kann die Lückendetektion mehrdeutig sein.
- Linienemissionen von Molekülen, die dazu neigen, schnell optisch dick zu werden (wie $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$), durchdringen nur die obersten Scheibenschichten, die kaum von der Planet-Scheibe-Wechselwirkung betroffen sind. Daraus folgt, dass die Identifikation von Scheibenlücken für massive Scheiben ($> 10^{-2} \text{ M}_\odot$) mit Moleküllinien kaum realisierbar ist.
- Für Scheiben mit geringerer Masse, abhängig vom Molekül und dessen optischen Eigenschaften (Häufigkeiten, Anregungszustand, Zusammensetzung) kann die Lücke für eine große Bandbreite von betrachteten Scheibenkonfigurationen beobachtet werden. Allerdings zeigt sich, dass dies nicht notwendigerweise an der zentralen Wellenlänge dieses Übergangs, sondern oftmals eher in den Linienflügeln möglich ist. Die Linie ist dort optisch dünner und die Emission stammt aus tieferliegenden Scheibenregionen, die dem Einfluss des Planeten ausgesetzt sind.
- Mit ALMA wird es machbar sein, Lücken unter der Verwendung molekularer Rotationsübergänge für verschiedene Scheibenkonfigurationen zu identifizieren, wenn die oben ausgeführten Effekte berücksichtigt werden (z. B. die Wahl eines optisch dünnen Moleküls bzw. eines passenden Übergangs). Insbesondere für geringe Scheibenmassen ($< 10^{-3} \text{ M}_\odot$) ist die Machbarkeit, Lücken mithilfe von Moleküllinien zu identifizieren, sehr vielversprechend. Für diesen Massenbereich füllen die Moleküllinien-Beobachtungen den Parameterraum, wo Kontinuums-Beobachtungen aufgrund des extrem niedrigen Flusses ver-

mutlich fehlschlagen [siehe Abb. 8 in der ergänzenden Studie von Ruge u. a. 2013].

- Die Simulationen basieren auf einer angenommenen Distanz von 140 pc und einer fixierten Himmelskoordinate (max. Erhebung $\sim 45^\circ$), um realistische Ergebnisse für die Taurus-Sternentstehungsregion zu erhalten. Somit verbessert sich die Wahrscheinlichkeit Lücken in Scheiben zu entdecken, die näher und an günstigeren Himmelspositionen liegen.

Zum Schluß soll betont werden, dass die mehrfache Beobachtung eines Objekts mit Molekülen unterschiedlicher Häufigkeiten die eindeutige Identifikation von Scheibenlücken und die Ableitung der physikalischen und chemischen Zusammensetzung von protoplanetaren Scheiben erlaubt. Besonders für Scheiben geringer Masse, bei denen eine Lückendetektion im Kontinuum aufgrund des niedrigen intrinsischen Flusses schwierig ist, ist die hier vorgeschlagene Molekülinienbeobachtung sehr vielversprechend.

Weiter ist anzumerken, dass diese Studie auf Hydrodynamik-Simulationen basiert und Magnetfelder vernachlässigt wurden. In der Studie von Uribe u. a. [2011] wurde zu diesem Thema angemerkt, dass die Präsenz schwacher Magnetfelder potenziell dazu führt, dass die Lücke weiter ausgedehnt ist.

Wird weiter auch die stellare Strahlung berücksichtigt, so ändert sich auch die Form der Lücke, da die Scheibenwände direkt durch den Stern bestrahlt werden können, was im Endeffekt zu tieferen Lücken führt. Dieser Effekt ist für die äußere Wand der Lücke stärker ausgeprägt, da sie stärker der direkten Sternstrahlung ausgesetzt ist, während die innere Wand größtenteils nur indirekt bestrahlt werden kann [Jang-Condell und Turner 2012]. Unter der Verwendung von SPH-Simulationen fanden Gonzalez u. a. [2012] heraus, dass Lücken tiefer sind für größere Staubkörner und größere Planeten als im Vergleich zu HD-Simulationen. Darüber hinaus wird in dieser Studie nur ein Jupiter-Massen-Planet betrachtet. Massivere Planeten würden die Lückenbreite aufgrund des höheren Gravitationspotentials weiter vergrößern.

Werden all diese Effekte berücksichtigt, so ist es potenziell einfacher mit ALMA-Beobachtungen Lücken nachzuweisen, als in dieser Studie abgeleitet wurde.

7

TURBULENTE SCHEIBEN

In diesem Kapitel wird untersucht, inwieweit sich die potenziell durch Magnetorotationsinstabilitäten hervorgerufene Turbulenz in protoplanetaren Scheiben durch die Beobachtung von Molekülllinien nachweisen lässt. Dazu werden die Ergebnisse von MHD-Simulationen verwendet, um zunächst mit Mol3D (vgl. Kapitel 4) ideale Geschwindigkeitskarten von Rotationsübergängen zu berechnen. Anhand dieser Karten wird der Einfluss der Turbulenz diskutiert. Im Anschluss werden mit CASA (Abschnitt 2.3.2) realistische ALMA-Beobachtungen simuliert, um die potenzielle Beobachtbarkeit von lokalen turbulenten Strömungszellen nachzuweisen.

7.1 EINLEITUNG UND MOTIVATION

Die jüngsten Beobachtungen (Abb. 2.1) der protoplanetaren Scheibe um HL Tau [ALMA Partnership 2015] demonstrieren eindrucksvoll das Potenzial, welches ALMA in seiner zukünftigen finalen Spezifikation erreichen wird. Zum ersten Mal überhaupt ist es möglich, die Struktur der Staubemission im (Sub-)Millimeter einer protoplanetaren Scheibe zu beobachten. Die beobachteten Ringstrukturen dieser sehr jungen Scheibe sind überraschend, da sie zeigen, dass die Entwicklung der Scheibe und die potenzielle Planetenentstehung sehr viel schneller abläuft, als bisher angenommen wurde.

Um diese Strukturen, und die zukünftiger Beobachtungen, sowie die Planetenentstehung im Allgemeinen erklären zu können, sind detaillierte Modellierungen der Staub- und Gasscheibe notwendig. Insbesondere die Beschreibung der Turbulenz hat sich als treibende Größe erwiesen, da sie auf der einen Seite die Akkretion und die Langzeitentwicklung [Shakura und Sunyaev 1973] der Scheibe steuert, aber auch entscheidend für die Fragmentierung der Scheibe und das Staubkornwachstum und damit die Planetenentstehung ist. Allerdings sind die Ursachen und die wirkenden Mechanismen der Turbulenz bis heute nicht im Detail verstanden. Um diese Frage eindeutig zu klären, werden weitere hochauflösende Beobachtungen sowie konsistente theoretische Modelle benötigt, die ein tiefgreifenderes Verständnis der Umgebung ermöglichen, in denen Planeten entstehen können.

Vor der Inbetriebnahme von ALMA waren die Erkenntnisse zur Turbulenz, die man aus den Beobachtungen gewinnen konnte, sehr limitiert. Dies lag zumeist an einer Kombination aus zu geringer räumlicher Auflösung in Verbindung mit der be-

schränkten Sensitivität vorhandener Instrumente. Aus diesem Grund sind Molekülbeobachtungen meistens auf das Kohlenmonoxid-Molekül beschränkt gewesen, da dies aufgrund der hohen Häufigkeit dieses Moleküls ein ausreichend signifikantes Signal-zu-Rausch-Verhältnis ermöglichte. Die aus diesen Beobachtungen abgeleiteten Linienbreiten für CO liegen typischerweise in der Größenordnung von 50–200 m/s [IkCa15; MWC 480 Piétu u. a. 2007] und lassen sich nicht allein durch die thermischen Molekühlbewegungen erklären (vgl. hierzu Abschnitt 4.2.4 zur Modellierung der Linienbreite). Wie allerdings schon in der vorangegangenen Studie zu Lücken in protoplanetaren Scheiben (Kapitel 6), wird CO allerdings gerade aufgrund der hohen Häufigkeiten schnell optisch dick und ist daher nur ein Indikator für eine dünne Schicht der Oberfläche der Scheiben. Um eine Aussage über die Turbulenz in den tiefer gelegenen Schichten machen zu können, bedarf es, analog zu den Lücken in Scheiben, Beobachtungen mit weniger häufigen Molekülen [z. B. HCN, CN, CS Chapillon u. a. 2012a; Guilloteau u. a. 2012]. Die bisherigen meist recht komplizierter Versuche die Rotationsübergänge dieser Moleküle zu beobachten, lassen, bedingt durch ein niedriges Signal-zu-Rausch Verhältnis, auf turbulente Linienbreiten derselben Größenordnung von $v_{turb} \approx 100$ m/s schließen. Allerdings sind dies, aufgrund der diskutierten Problematik, meistens über die ganze Scheibe gemittelte Werte und es gibt nur sehr wenige Hinweise auf eine radiale oder vertikale Abhängigkeit der Turbulenz [Guilloteau u. a. 2012].

Durch die hohe räumliche und spektrale Auflösung, die ALMA in der finalen Ausbaustufe voraussichtlich bieten wird, in Kombination mit der geplanten und erwarteten Sensitivität, wird es nun in naher Zukunft möglich sein durch Linienbeobachtungen verschiedener komplementärer Moleküle die lokale Turbulenz in protoplanetaren Scheiben zu beobachten. Diese zukünftigen Beobachtungen sind daher potenziell in der Lage, unser Verständnis der physikalischen Zustände der Scheibe grundlegend zu verbessern und folglich auch die aktuellen Planetenentstehungstheorien zu überprüfen.

Ein möglicher Kandidat, welcher die beobachtete Turbulenz erklären könnte, ist die sogenannte Magnetorotationsinstabilität (MRI) [Balbus und Hawley 1991]. Allerdings wurde erst kürzlich in der Zusammenfassung von Turner u. a. [2014] darauf hingewiesen, dass große Teile der Gas scheibe von der magnetischen Entwicklung entkoppelt sind. Bis heute wird angenommen, dass sich die MRI-Aktivität nur auf den innersten, sehr heißen Scheibenrand sowie auf die äußersten Scheibenbereiche, welche möglicherweise durch externe kosmische Strahlung ionisiert werden [Cleeves u. a. 2015], auswirken kann.

In der dieser Studie vorangegangenen Arbeit [Flock u. a. 2015] wurden nicht ideale 3D Magnetohydrodynamik-Simulationen der äußeren Regionen typischer T Tauri-Scheiben durchgeführt und präsentiert. Es konnte unter anderem gezeigt werden, dass sowohl symmetrische als auch asymmetrische Strukturen in magnetisierten Scheiben auch ohne die Annahme eines eingebetteten Planeten durch MRI-Turbulenz erklärt werden können. Weiter weisen die in den Simulationen beobachteten lokalen Abweichungen des Geschwindigkeitsfelds im Vergleich zu idealer Kepler-Rotation auf lokale Variationen der Turbulenz hin.

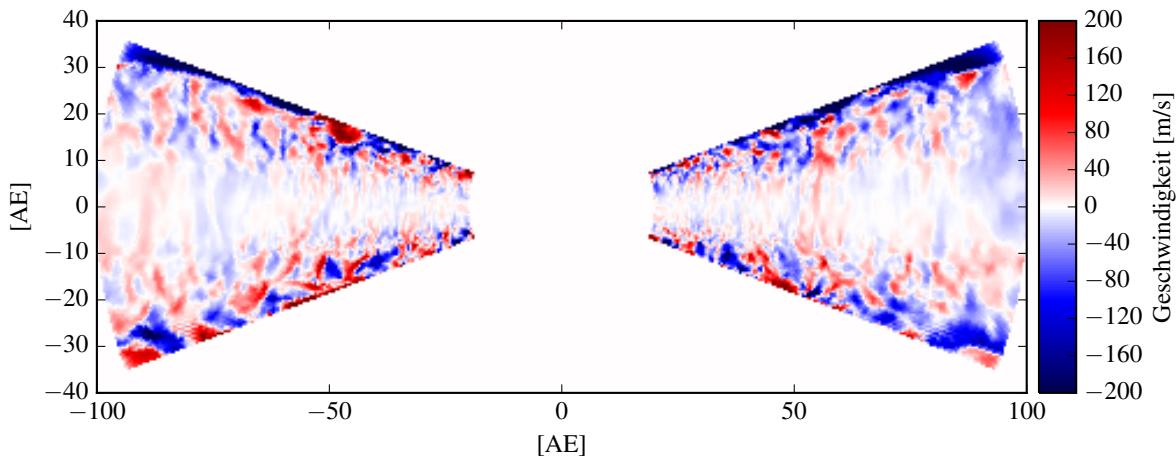


Abbildung 7.1 – Schnitt senkrecht zur Scheibenmittelebene. Farblich codiert ist die vertikale Komponente des Geschwindigkeitsfelds, welche sich aus den MHD-Simulationen ergibt. Deutlich ist zu erkennen, dass die Scheibenmittelebene kaum vertikale Geschwindigkeiten aufweist, da in diesen Zonen die MRI, aufgrund des wenig ionisierten Gases, nicht wirken kann. Anzumerken ist, dass im Fall perfekter Kepler-Rotation keine vertikale Komponente existiert. Daher kann diese Geschwindigkeit als Abweichung von der Kepler-Rotation interpretiert werden.

In dieser Studie werden zwei Fragestellungen diskutiert. Zum einen wird gezeigt, dass die Linienbreite signifikant von dem beobachteten Übergang abhängt und damit durch die geschickte Wahl verschiedener Moleküle mit unterschiedlichen Häufigkeiten die Turbulenz in einzelnen Schichten der Scheibe vermessen werden kann. Zum anderem wird diskutiert, unter welchen Voraussetzungen turbulente Strömungen im idealen, sowie im realen Fall am Beispiel von simulierten ALMA-Beobachtungen nachgewiesen werden können.

Dazu werden, basierend auf den Dichte- und Geschwindigkeitsverteilungen, die aus den MHD-Simulationen (Abschnitt 7.2) resultieren, Linien-Strahlungstransport-Simulationen mit *Mol3D* durchgeführt. Es werden unterschiedliche typische Linienübergänge, namentlich $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2), $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2), HCO^+ (4-3), und CS (7-6) [z.B. Kastner u. a. 1997; Öberg u. a. 2010; Thi u. a. 2004], betrachtet, die aufgrund ihrer Häufigkeiten und chemischen Zusammensetzungen Indikatoren für verschiedene Schichten protoplanetarer Scheiben sind. Weiter sind die gewählten Molekülübergänge alle mit ALMA in Band 7 beobachtbar, wie zuvor in Abschnitt 6.3.4 (vgl. auch Tabelle 6.4) gezeigt wurde.

7.2 3D MAGNETOHYDRODYNAMIK-SIMULATIONEN

Die zugrunde liegenden MHD-Simulationen und Methoden wurden in der Studie von Flock u. a. [2015] vorgestellt. An dieser Stelle werden nur die grundlegenden Annahmen sowie die für diese Studie wichtigen Ergebnisse dieser Studie kurz vor gestellt.

Wie schon beschrieben, wurden nicht ideale dreidimensionale Magnetohydrodynamik-Simulationen mit dem PLUTO-Programm durchgeführt, um die Gas- und Staubdynamik in den äußeren Bereichen magnetisierter protoplanetarer Scheiben zu studieren. Zu diesem Zweck wurden zwei Modelle mit unterschiedlich starker Turbulenz, welche sich aus dem Grad der magnetischen Kopplung ergibt, simuliert. Als Anfangsbedingungen dienten Ergebnisse (z. B. typische Ausdehnung und Masse, Staubtemperatur, die mit MC3D berechnet wurde), die auf den Modellierungen der Systeme HH30 [Guilloteau u. a. 2008; Madlener u. a. 2012], CB26 [Sauter u. a. 2009], und des *Butterfly star* [IRAS 04302 + 2247, Wolf u. a. 2003; Gräfe und Wolf 2013] basieren. Weiter wurde ein Widerstandsprofil¹ verwendet, welches auf die Ergebnisse der Staubchemie-Berechnungen von Dzyurkevich u. a. [2013] zurückgeht. Der initiale magnetische Fluss sorgt dafür, dass die MRI ausgelöst wird, welches Turbulenz in den hoch ionisierten Bereichen der Scheibe zur Folge hat.

Die Simulationen, bei denen ein Staub-zu-Gas Verhältnis von 1:99 angenommen wurde, bilden eine Lücke und einen scharfen Dichtesprung² an dem Übergang zu dem Bereich aus, der nicht durch Strahlung ionisiert werden kann und somit MRI inaktiv ist³. Diese Strukturen zeigen sich zeitlich stabil und es kann zwischen zwei unterschiedlichen Zuständen unterschieden werden. Zum einen eine Achsen-symmetrische Lücken- und Ringstruktur und zum anderen ein Zustand mit einem Wirbel. Diese beiden Zustände sind potenziell durch Beobachtungen unterscheidbar, wenn große Staubkörner mit betrachtet werden, die sich am Rand der Lücke und im Wirbel anhäufen (Ruge u. a., wird in Kürze in dem Fachmagazin *Astronomy & Astrophysics* eingereicht).

Um die Beobachtbarkeit dieser Strukturen zu diskutieren, wurde bisher nur die Kontinuumsstrahlung untersucht sowie die zugehörigen Strahlungstransportsimulationen des Staubs durchgeführt. Der Einfluss des Geschwindigkeitsfelds der Scheibe spielt bei diesen Simulationen keine Rolle und wurde daher nicht betrachtet. Folglich sind auch keine Aussagen darüber möglich, ob und wie die in den MHD-Simulationen beobachtbare lokale Turbulenz in der Realität potenziell beobachtbar ist.

In dieser Studie wird nun der Einfluss der durch die MRI ausgelösten Turbulenz auf Moleküllinien simuliert. Wie schon an mehreren Stellen dieser Arbeit (z. B. Abschnitt 4.2.4 und 6.3.1) dargelegt wurde, ist die Molekülemission unmittelbar mit dem zugrunde liegenden Geschwindigkeitsprofil verbunden und daher ein potenzieller Indikator der Turbulenz. Der genaue Einfluss auf die Linienemission von Molekülen ist Gegenstand dieser Studie. Als Referenz zu diesem MHD-Scheibenmodell (D2G_e-2) wird zusätzlich ein voll turbulentes MHD-Scheibenmodell mit einem Staub-zu-Gas Verhältnis von 1:9999 (D2G_e-4) betrachtet.

¹ engl.: resistivity profile

² engl.: jump structure

³ engl.: dead zone

7.3 LINIEN-STRAHLUNGSTRANSPORT

Die Dichteveilung und das Geschwindigkeitsfeld des Gases, die den Kern der Simulationen bilden, werden aus den MRI-Simulationen übernommen, die in der Studie von [Flock u. a. \[2015\]](#) präsentiert wurden. Der korrekte Übertrag zwischen den beiden verwendeten Programmen (von PLUTO nach *Mol3D*) wird dadurch sichergestellt, dass sowohl für die MRI Simulationen als auch für den Linien-Strahlungstransport das gleiche Gitter [vgl. Tabelle 1 in [Flock u. a. 2015](#)] verwendet wird.

7.3.1 Stellare und Scheibeneigenschaften

Als zentralen Stern, der maßgeblich für den Temperaturhaushalt der Scheibe verantwortlich ist, wird in dieser Arbeit ein typischer Vor-Hauptreihenstern (T Tauri) angenommen, der eine Effektivtemperatur von 4 000 K sowie eine Masse von 0.5 Sonnenmassen aufweist. Die Leuchtkraft ergibt sich zu 0.95 L_{\odot} . Alle hier verwendeten Sternparameter sind in Tabelle 7.1 zur Übersichtlichkeit zusammengefasst. Weiter wird für den ersten Teil dieser Studie immer angenommen, dass sich die Scheibe in einer typischen Entfernung von $d = 140$ pc (z. B. das Sternentstehungsgebiet im Sternbild des Stiers) befindet. Erst im letzten Teil dieser Studie, indem ALMA-Beobachtungen vorgeschlagen und simuliert werden, werden verschiedene Objektdistanzen diskutiert.

Parameter	Wert
T_{Stern} [K]	4 000
M_{Stern} [M_{\odot}]	0.5
L_{Stern} [L_{\odot}]	0.95
M_{Scheibe} [M_{\odot}]	0.085
R_{innen} [AE]	20
$R_{\text{außen}}$ [AE]	100
Entfernung [pc]	140

Tabelle 7.1 – Betrachteter Parameterraum der Scheibe um den zentralen T Tauri-Stern

7.3.2 Molekülverteilung und Besetzungszahlen

Dieser Abschnitt beschreibt die Annahmen über die Verteilungen der Moleküle sowie die Berechnungen der Besetzungszahlen. Es werden vier Moleküle mit verschiedenen Häufigkeiten und chemischen Zusammensetzungen betrachtet, die bereits in protoplanetaren Scheiben gefunden wurden und mit ALMA beobachtbar sind, namentlich $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2), $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2), HCO^+ (4-3) und CS (7-6). Die relevanten Eigenschaften dieser Moleküle sind in der Tabelle 6.4 in Kapitel 6.2.2 aufgeführt. Wie schon in der vorangegangenen Studie praktiziert, sind die Eigenschaften (z. B. Einstein-Koeffizienten und Kollisionsraten) aus der *Leiden Atomic and Molecular Database* (vgl. auch Abschnitt 4.2.4) entnommen.

Als erstes werden, analog zu der Vorgehensweise in der Studie über die Beobachtbarkeit von Lücken in Scheiben, konstante Molekülhäufigkeiten relativ zur Verteilung von molekularem Wasserstoff verwendet. Diese Verteilungen basieren auf den in der Arbeit von [Pavlyuchenkov u. a. \[2007\]](#) präsentierten Werten und gehen auf chemische Gas-Staub-Modelle mit Oberflächenreaktionen [[Semenov u. a. 2004, 2005](#)] zurück, die wiederum auf der UMIST 95 Datenbank für Gas-Phasen-Reaktionen basieren.

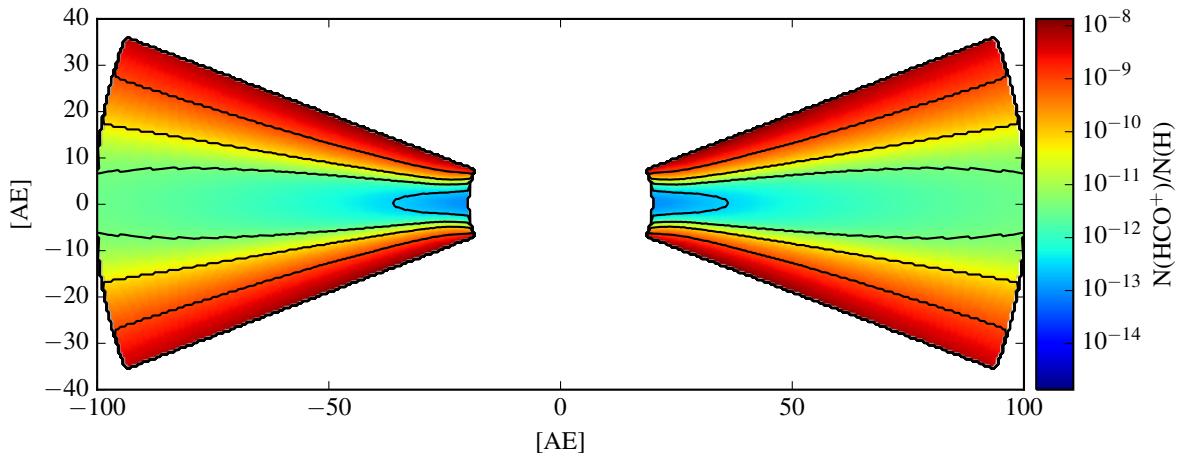


Abbildung 7.2 – Darstellung der HCO^+ -Häufigkeitsverteilung relativ zu molekularem Wasserstoff (H_2). Diese geschichtete rotationssymmetrische Verteilung ist ein Ergebnis der Studie von [Dzyurkevich u. a. \[2013\]](#).

Um das Modell weiter zu verbessern, wird im zweiten Schritt eine geschichtete HCO^+ -Häufigkeit verwendet. Sie ist das Ergebnis der Berechnungen der Staubchemie von [Dzyurkevich u. a. \[2013\]](#) und ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Die Verteilungsfunktion ist rotationssymmetrisch und diente ursprünglich zur Berechnung des Widerstandsprofils der MRI-Simulationen (siehe Abschnitt 7.2). Es ist daher in sich konsistent, diese Verteilung für den Linien-Strahlungstransport des HCO^+ -Moleküls zu verwenden. Weiter wird eine perfekte Kopplung zwischen Gas und Staub angenommen und ein Staub-zu-Gas Verhältnis von 1:99 bzw. 1:9999, je nach verwendetem Modell. Die Besetzungszahlen werden mit der LVG-Methode berechnet, die sich, wie bereits gezeigt, für protoplanetare Scheiben besonders anbietet.

7.3.3 Definition der betrachteten Modelle

Zunächst werden die verschiedenen Ansätze diskutiert, die es ermöglichen, Geschwindigkeitskarten und Spektren zu berechnen. Gewöhnlich wird die Breite von beobachteten Moleküllinien mithilfe einer Kombination von thermischer Linienverbreiterung und einer Annahme über die nicht aufgelöste Turbulenz v_{turb} (vgl. hierzu Formel 4.18 in Abschnitt 4.2.4) modelliert. Dies ist notwendig, da sich die beobachteten Liniendurchmesser von $v \sim 0.05 - 0.2 \text{ km/s}$ [z. B. [Piétu u. a. 2007](#); [Hughes u. a. 2011](#)] nicht alleine mit thermischer Verbreiterung ($v_{\text{kin}} < 0.1 \text{ km/s}$) erklären lassen.

Aufgrund der unzureichenden räumlichen Auflösung sowie geringen Sensitivität wurde hierzu meistens über die gesamte Scheibe gemittelt und daher auch nur ein globaler Wert für v_{turb} ermittelt. Mit der Annahme, dass die Scheibe perfekt Keplerrotiert, können die Linienemissionen modelliert werden und Rückschlüsse über die Scheibenstruktur (z. B. Temperatur- und Dichtestruktur) gewonnen werden [z. B. [Pačnić u. a. 2009](#), im Fall der Scheibe um IM Lup]. Im Folgenden wird dieser übliche Ansatz das *globale* Modell genannt, da eine turbulente Geschwindigkeit $v_{\text{turb}} = \text{konstant}$

für die gesamte Scheibe angenommen wird.

Wie zuvor schon diskutiert, konnten Flock u. a. [2015] in ihrer Studie zeigen, dass diese Annahme nicht unbedingt gerechtfertigt und zumindest zu hinterfragen ist. So ist die Turbulenz, in der Studie als Abweichung zur Kepler-Rotation definiert, in der oberen Scheibenschicht aufgrund der MRI sehr viel höher als in der Scheibenmittelebene (vgl. Abbildung 7.1). Da das gesamte Geschwindigkeitsfeld als Ergebnis der MHD-Simulationen, im Gegensatz zu realen Linien-Beobachtungen, bekannt ist, kann in diesem Fall für den Linien-Strahlungstransport ein anderer Ansatz verwendet werden.

Es wird von der oben beschriebenen Annahme einer globalen turbulenten Geschwindigkeit v_{turb} abgesehen und statt der Annahme perfekter Kepler-Rotation wird das aus den MHD-Simulationen resultierende Geschwindigkeitsfeld verwendet, welches als Kombination der Kepler-Rotation mit der lokalen Turbulenz identifiziert werden kann. Dieser Ansatz wird daher in dieser Studie im Folgenden das *lokale* Modell genannt.

Um Geschwindigkeitskarten und Spektren der betrachteten Linienübergänge zu berechnen, wird der Strahlenverfolgungs-Algorithmus von *Mol3D* benutzt.

Am Rande sei noch erwähnt, dass die Kontinuumssstrahlung natürlich aus Konsistenzgründen mitgerechnet wird. Allerdings wird auf eine detaillierte Präsentation und Untersuchung der Staubemission an dieser Stelle verzichtet, da sie von Flock u. a. [2015] bereits ausführlich diskutiert wurde.

7.4 ERGEBNISSE

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Strahlungstransportsimulationen mit dem *lokalen* und *globalen* Modell dargestellt und die Unterschiede diskutiert. Zu diesem Zweck werden zum einen die resultierenden Linienbreiten miteinander verglichen und eine Aussage über die turbulente Geschwindigkeit v_{turb} in unterschiedlichen Scheibenschichten abgeleitet. Des Weiteren wird der Einfluss der Turbulenz auf die Linienemission mithilfe von räumlich und spektral aufgelösten Geschwindigkeitskarten überprüft und geklärt, ob dies in naher Zukunft mit ALMA beobachtbar ist.

7.4.1 Ableitung der Linienbreite

Die Beobachtungen von Rotationsübergängen typischer Moleküle in protoplanetaren Scheiben ergaben ein turbulente Linienbreiten in der Größenordnung von $v_{turb} = 50 - 200 \text{ m/s}$ [z. B. Piétu u. a. 2007; Chapillon u. a. 2012b].

Die exakte Bestimmung der Turbulenz ist auch heutzutage sehr kompliziert, da sie besonders hohe instrumentale Anforderungen stellt und daher große Unsicherheiten in der anschließenden Modellierung nach sich zieht. An dieser Stelle wird nun gezeigt, dass die Turbulenz, die durch die MRI hervorgerufen wird, potenziell in der Lage ist, die referierten Linienbreiten zu erklären.

Aus diesem Grund werden auf Grundlage des D2G_e-2-Modells der MHD-Simulation mit *Mol3D* die Linienspektren der vier betrachteten Rotationsübergänge, unter Verwendung des *globalen* und *lokalen* Modells zur Beschreibung der Turbulenz, erzeugt. Dabei wird für diesen Abschnitt angenommen, dass die Scheibe zum Beobachter in Draufsicht erscheint, um den Einfluss der Kepler-Rotation zu eliminieren.

Molekül & (Übergang)	v_{turb} [m/s]
$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2)	95
HCO^+ (4-3)	80
CS (7-6)	65
$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2)	35

Tabelle 7.2 – Abgeleitete turbulente Geschwindigkeiten v_{turb} für die betrachteten Rotationsübergänge

In Abbildung 7.3 sind die resultierenden Spektren unter Verwendung des *lokalen* Modells dargestellt und die FWHM⁴-Werte für jeden Übergang bestimmt. Es lassen sich deutliche Unterschiede zwischen den einzelnen Übergängen ausmachen. Zum einen erscheinen die $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ - und HCO^+ -Spektren, im Gegensatz zu den CS- und $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Spektren, unsymmetrisch in Bezug auf die unverschobene Übergangsfrequenz ($v = 0$ m/s). Zum anderen unterscheiden sich die Linien auch durch ihre FWHM-Werte. Beide Unterschiede lassen sich darauf zurückführen, dass die Linienemission jedes Molekülübergangs aus unterschiedlichen Scheibenregionen stammt, die je-

weils eine für diese Scheibenschicht charakteristische Temperatur und Turbulenz aufweisen. Zum Beispiel stammt die $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Emission aus der heißen und turbulenten Scheibenoberfläche, während die $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Emission, aufgrund der geringeren optischen Tiefe dieses Übergangs, größtenteils aus der kalten und wenig turbulenten Scheibenmittelebene stammt. Aus diesem Ergebnis folgt unmittelbar die Erkenntnis, dass mithilfe unterschiedlicher Molekülübergänge die Turbulenz der Scheibe, auch ohne räumlich aufgelöste Beobachtungen, vermessen werden kann.

Um nun einen Vergleich mit den aus Beobachtungen abgeleiteten Linienbreiten zu ermöglichen, wird eine einfache Anpassung durchgeführt. Dazu wird die turbulente Geschwindigkeit v_{turb} in Schritten von 5 m/s variiert und mit dem *globalen* Modell das zugehörige Spektrum berechnet. Im Anschluss wird der FWHM-Wert bestimmt und mit dem des *lokalen* Modells verglichen, bis v_{turb} bestimmt ist. Diese Vorgehensweise muss für jeden betrachteten Übergang durchgeführt werden, da jeder Übergang, wie oben beschrieben, aus einer anderen Scheibenregion stammt. Es zeigt sich, dass sich für den oft beobachteten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang eine turbulente Linienbreite von $v_{\text{turb}} \approx 95$ m/s ergibt, welche in sehr guter Übereinstimmung mit den aus Beobachtungen bekannten Werten (s. o.) steht. Die weiteren bestimmten Werte der turbulenten Linienbreite sind in der Tabelle 7.2 dargestellt.

Die Ergebnisse dieses Abschnitts lassen zum einen erkennen, dass die Turbulenz, welche durch die MRI hervorgerufen wird, die beobachteten Linienbreiten erklären kann. Weiter lässt sich potenziell durch zukünftige Beobachtungen mit Molekülübergängen verschiedener optischer Tiefen die Turbulenz in unterschiedlichen Scheibenschichten direkt vermessen und untersuchen. Damit kann die Linienbreite

⁴ engl.: Full Width at Half Max

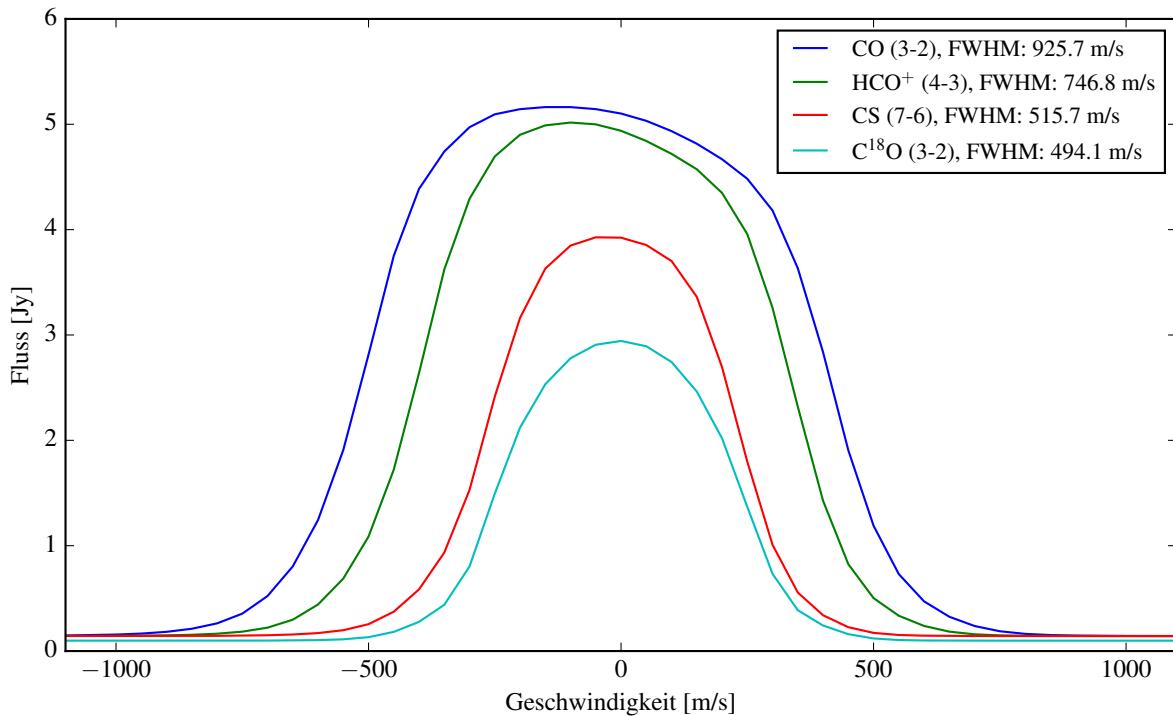


Abbildung 7.3 – Ideale Linienspektren für $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2), HCO^+ (4-3), CS (7-6) und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) unter Verwendung des *lokalen* Modells zur Beschreibung der Turbulenz.

als Mittel zur Diagnostik verwendet werden, wie es auch schon im Fall von selbst-graviternden Scheiben von [Forgan u. a. \[2012\]](#) vorgeschlagen wurde. Damit ist ein Ansatz zur Überprüfung der vorhandenen theoretischen Scheibenmodelle geschaffen.

7.4.2 Beobachtbarkeit von lokalen Asymmetrien

Nachdem zuvor die unaufgelösten Spektren diskutiert und analysiert wurden, werden nun die räumlich und spektral aufgelösten Geschwindigkeitskarten betrachtet, wobei zunächst für alle Simulationen eine konstante Molekülhäufigkeit angenommen wird. In Abbildung 7.4 ist der Vergleich zwischen dem *globalen* (obere Reihe) und dem *lokalen* Modell (untere Reihe) für das D2G_e-2-Modell dargestellt. In diesem Fall ist der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang für drei ausgewählte Geschwindigkeiten um die zentrale Frequenz ($v = 0$ m/s) dargestellt. Auch wird zunächst angenommen, dass die Scheibe in *Draufsicht* erscheint.

Es ist deutlich zu erkennen, dass bei dem *lokalen* Modell die Linienkarten aufgrund der Berechnungsmethode symmetrisch um die Zentralfrequenz sind (vgl. ± 400 m/s Karten). Die zu erkennenden Strukturen sind allein durch die Inhomogenitäten in der Dichtestruktur der obersten Scheibenschichten bedingt.

Im Gegensatz dazu steht das *globale* Modell zur Beschreibung der turbulenten Geschwindigkeit. Durch die Berücksichtigung des Geschwindigkeitsfelds lassen sich

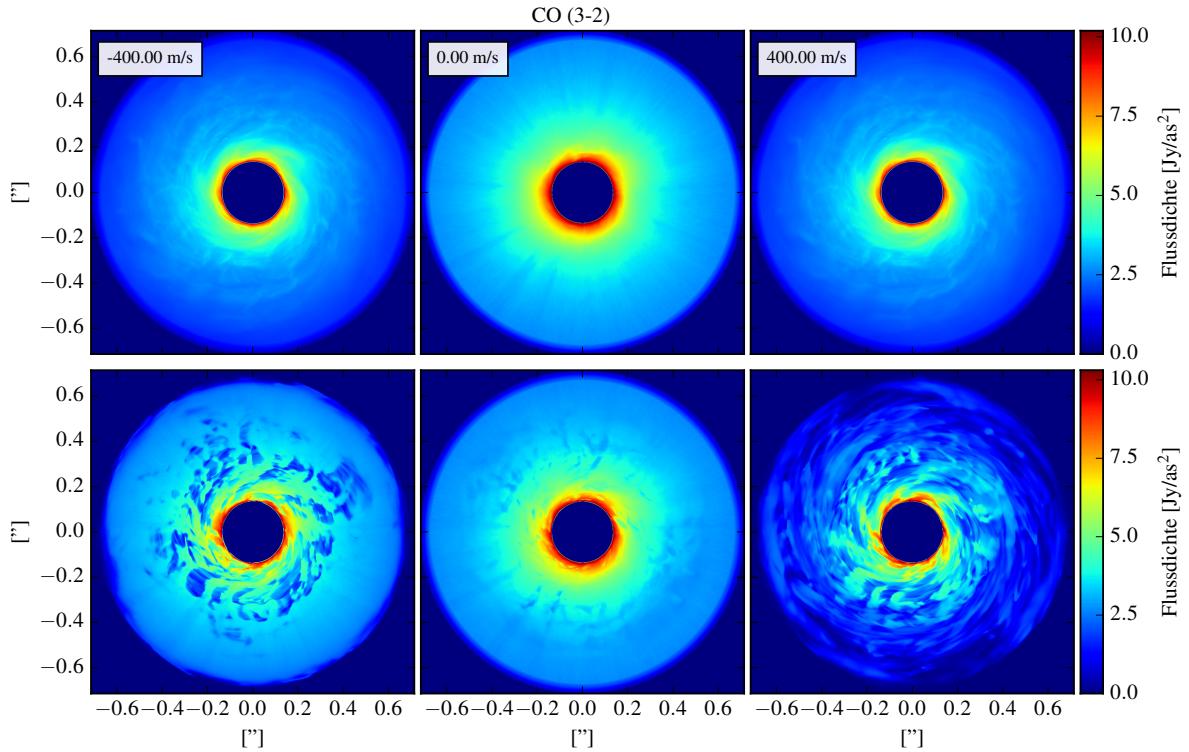


Abbildung 7.4 – $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang für ausgewählte Geschwindigkeiten. Obere Reihe: Globales Modell mit einer turbulenten Geschwindigkeit von $v_{\text{turb}} = 95 \text{ m/s}$. Untere Reihe: Lokales Modell. Die Flussdichten beider Modelle sind sehr vergleichbar. Allerdings ist das globale Modell nicht in der Lage die turbulenten Strömungen zu reproduzieren.

weitere Strukturen erkennen, die die Strukturen, welche allein durch die Molekül-dichte hervorgerufen werden, überlagern. So ist direkt zu erkennen, dass die Geschwindigkeitskarten bei $v = \pm 400 \text{ m/s}$ im Vergleich deutliche Unterschiede aufweisen. Auch sind sie nicht symmetrisch um die Zentralfrequenz. Deutlich sind lokal separierte Strömungszellen auszumachen, die sich, da die Scheibe in diesem Fall eine Inklination von 0° hat, von dem Beobachter weg (Bereiche hoher Flussdichte in der $v = +400 \text{ m/s}$ Karte) oder auf den Beobachter zu bewegen (Bereiche hoher Flussdichte in der $v = -400 \text{ m/s}$ Karte, vgl. dazu auch Abschnitt 4.2.4). Sie haben Ausdehnungen von bis zu 10 AE. Diese durch die Turbulenz getriebenen Strömungszellen sind das vorhergesagte Resultat der stark ionisierten obersten Scheibenschichten. Aufgrund der hohen Molekülhäufigkeiten tendieren die niedrigen $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ -Übergänge dazu sehr schnell optisch dick zu werden (vgl. Kapitel 6). Aus diesem Grund können nur die obersten Schichten von typischen protoplanetaren Scheiben beobachtet werden und Strukturen in tiefer gelegenen Scheibenregionen können nicht beobachtet werden. Wie schon beschrieben, lassen sich unterschiedliche Scheibenschichten untersuchen, indem andere, weniger häufige Moleküle und optisch dünnerne Übergänge zur Beobachtung gewählt werden. Dieser Effekt wird besonders beim Vergleich der vier in dieser Studie betrachteten Moleküllinien deutlich (siehe Abbildung).

Weiter ist in dieser Abbildung 7.5 exemplarisch für die hier betrachteten Linienüber-

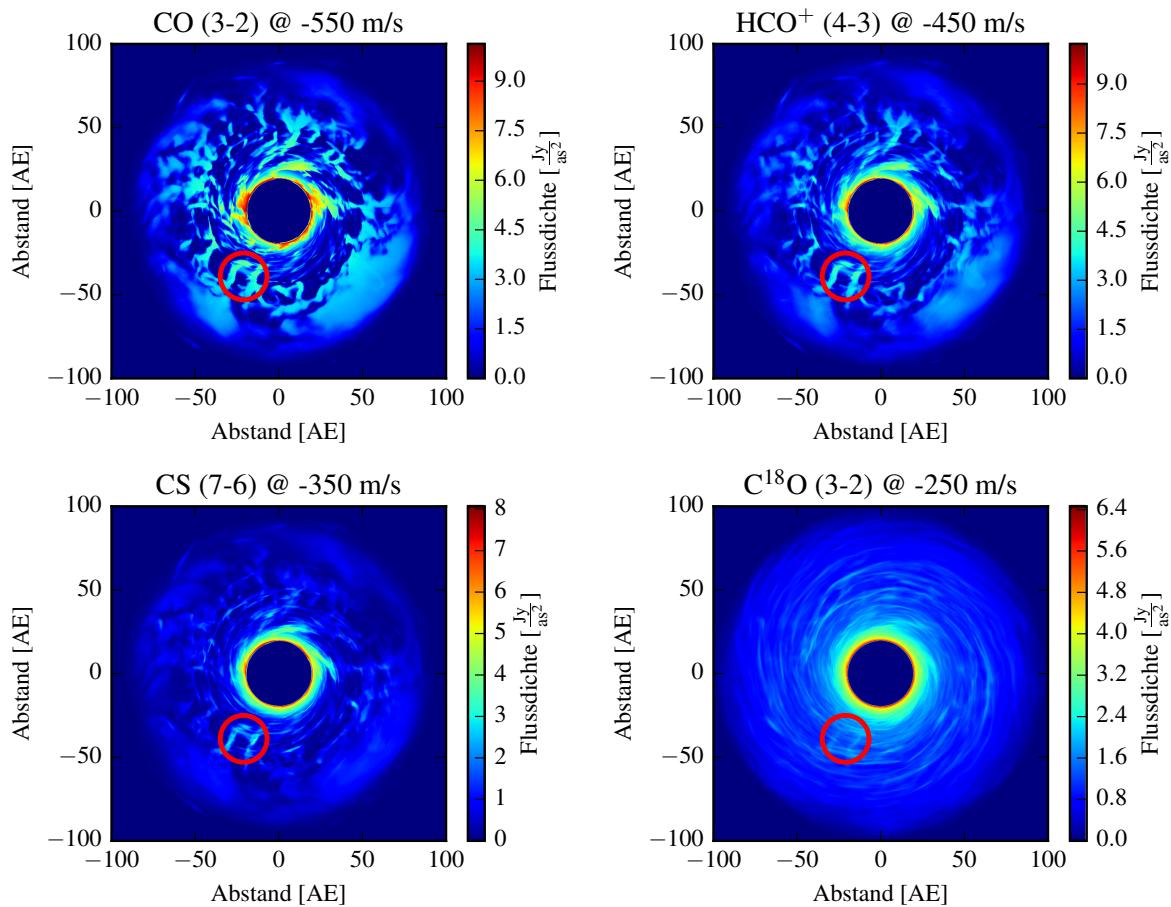


Abbildung 7.5 – Geschwindigkeitskarten der vier in dieser Studie betrachteten Rotationsübergänge für das D2G_e-2-Modell unter Verwendung des *lokalen*-Modells. Ausgewählte turbulente Strömungszellen sind zur Verdeutlichung mit einem roten Kreis versehen.

gänge immer die jeweilige Geschwindigkeitskarte dargestellt, bei der ausgewählte separierte Strömungszellen (mit einem roten Kreis markiert) eindeutig zu identifizieren sind.

Dabei ist zu erkennen, dass $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ und HCO^+ turbulente Strukturen vergleichbarer Intensität aufzeigen, wobei die Emission der HCO^+ -Linie nicht mehr aus den obersten Schichten stammt und die Scheibe weniger turbulent erscheint.

Unter Verwendung der CS (7-6) und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergänge lässt sich noch tiefer in die Scheibe schauen. Im Fall von $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ ist besonders deutlich zu erkennen, dass kaum noch turbulente Strömungen beobachtet werden können und die Scheibe, im Vergleich mit der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Linie, sehr homogen erscheint.

Da protoplanetare Scheiben nicht in perfekter Draufsicht zum Beobachter orientiert erscheinen, wird dasselbe Scheibenmodell bei einer Inklination von $i = 60^\circ$ simuliert, um zu überprüfen, ob die turbulenten Strukturen auch in diesem Fall nachzuweisen sind. Das Ergebnis dieser Simulationen ist in Abbildung 7.6 dargestellt.

Die Bereiche rechts sind in allen Bildern von dem jeweiligen Linienübergang dominiert. In den linken Bereichen lässt sich die Reemissionsstrahlung der Staubkom-

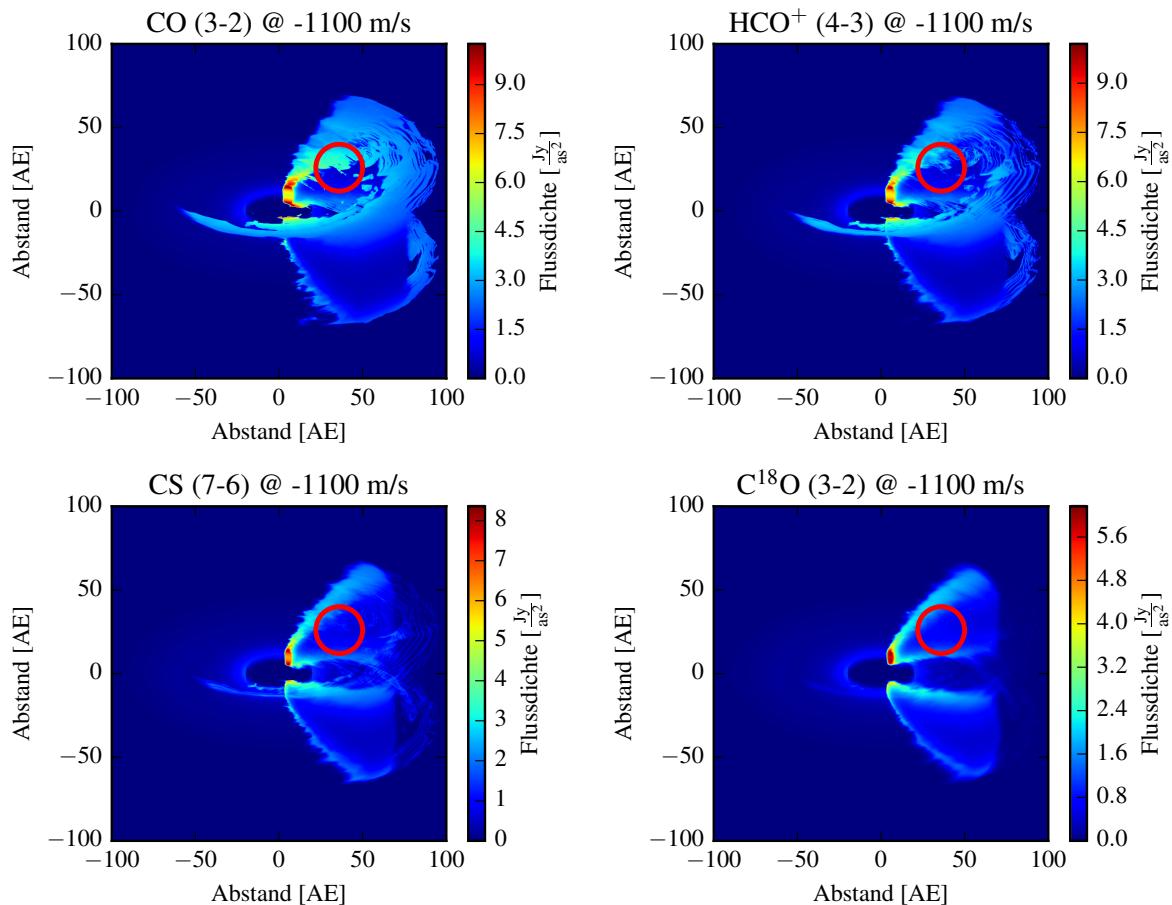


Abbildung 7.6 – Geschwindigkeitskarten analog zu Abbildung 7.5 nur mit einer Scheibeninklination von $i = 60^\circ$.

ponente ausmachen, da dort die Linien bei dem präsentierten Geschwindigkeitskanal von $v = -1100 \text{ m/s}$ optisch dünn sind. Deutlich ist der zuvor bereits diskutierte Effekt zu erkennen, dass die Linienemission aus einer dünnen Scheibenschicht stammt und dabei der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang ein Indikator für die obersten, turbulentesten Scheibenschichten ist. Aufgrund der Projektion des Rotationsfelds ist es schwierig, individuelle turbulente Strömungszellen nachzuweisen. Allerdings lassen sich in diesem idealen Fall insbesondere aus dem Vergleich der $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ - und HCO^+ -Linienkarten Bereiche identifizieren, die ähnliche turbulente Strukturen aufweisen (rote Kreise).

In Abbildung 7.7 ist zum Vergleich das voll turbulente D2G_e-4-Modell der MHD-Simulationen, ebenfalls unter Verwendung des *lokalen* Modells, dargestellt. Dieses Scheibenmodell weist keine deutlich zu trennenden Strömungszellen auf, die sich auf den Beobachter zu oder von ihm weg bewegen. Qualitativ sind keine so deutlichen Unterschiede wie im Falle des D2G_e-2-Modells (Abb. 7.5) zwischen den einzelnen Molekülen auszumachen. Auf eine weitere Betrachtung der Scheibe mit einer Inklination von $i = 60^\circ$ wird daher verzichtet.

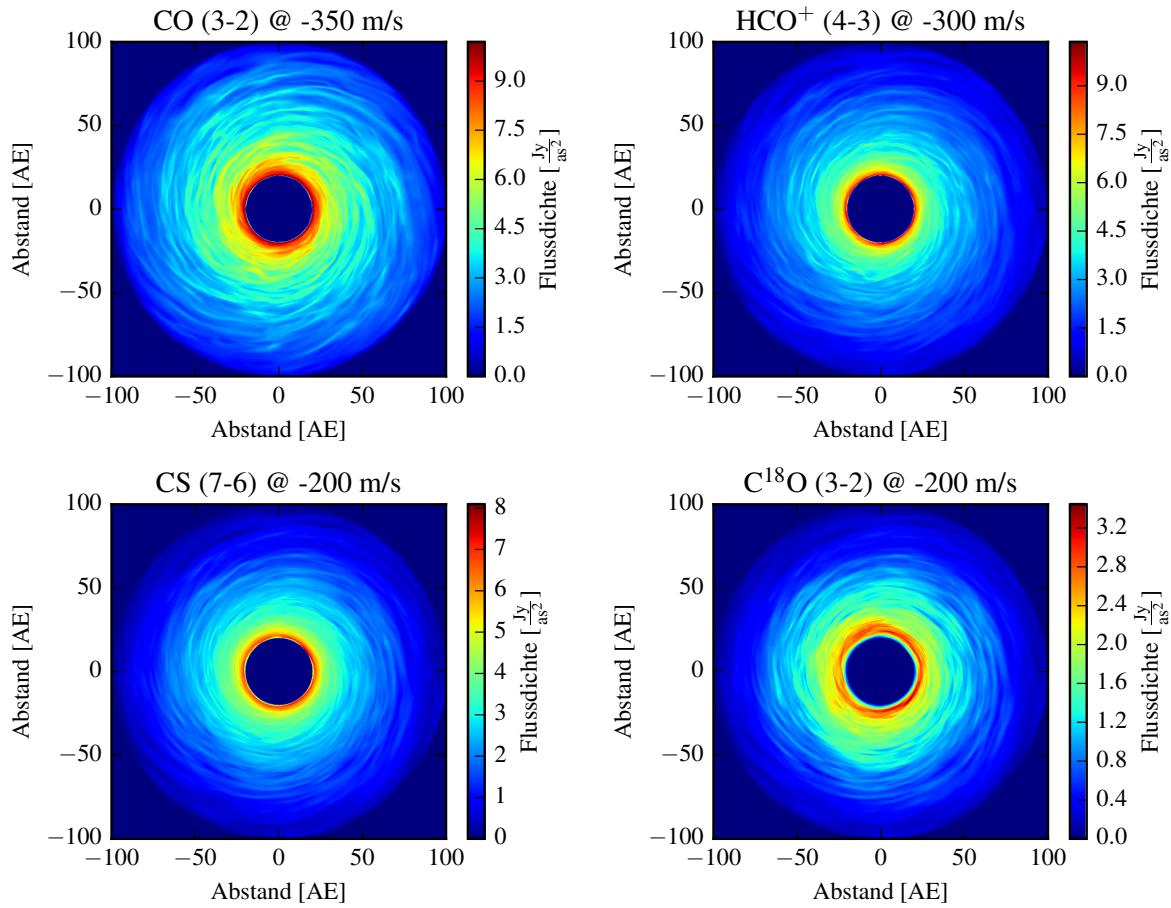


Abbildung 7.7 – Geschwindigkeitskarten der vier betrachteten Rotationsübergänge für das D2G_e-4-Modell unter Verwendung des *lokalen*-Modells. Es lassen sich keine deutlich separierten Strömungszellen identifizieren.

7.4.3 Betrachtung einer geschichteten Molekülverteilung

Abschließend zur Betrachtung der idealen Linienkarten wird der Einfluss der physikalisch motivierten, geschichteten HCO⁺-Verteilung (siehe Abb. 7.2) auf die zuvor diskutierte Beobachtbarkeit von turbulenten Strömungszellen behandelt. Dazu wird, basierend auf dem D2G_e-2-Modell der MHD-Simulationen, eine repräsentative Geschwindigkeitskarte ($v = -250$ m/s) mit den zuvor betrachteten Modellen verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.8 dargestellt.

Es zeigt sich, dass das geschichtete Modell (Abb. 7.8, unten rechts) qualitativ mit dem nicht geschichteten Modell (Abb. 7.8, unten links) sehr gut vergleichbar ist. Aufgrund der deutlich geringeren Anzahl an HCO⁺-Molekülen erscheint die Scheibe allerdings ein wenig transparenter und am Innenrand der Scheibe ist die Flussdichte deutlich reduziert. Dennoch sind die turbulenten Strömungszellen deutlich auszumachen.

Zusätzlich ist zum Vergleich oben rechts die thermische Reemission der Scheibe bei $\lambda = 880$ μm dargestellt. Die Flussdichte ist um mehr als eine Größenordnung ge-

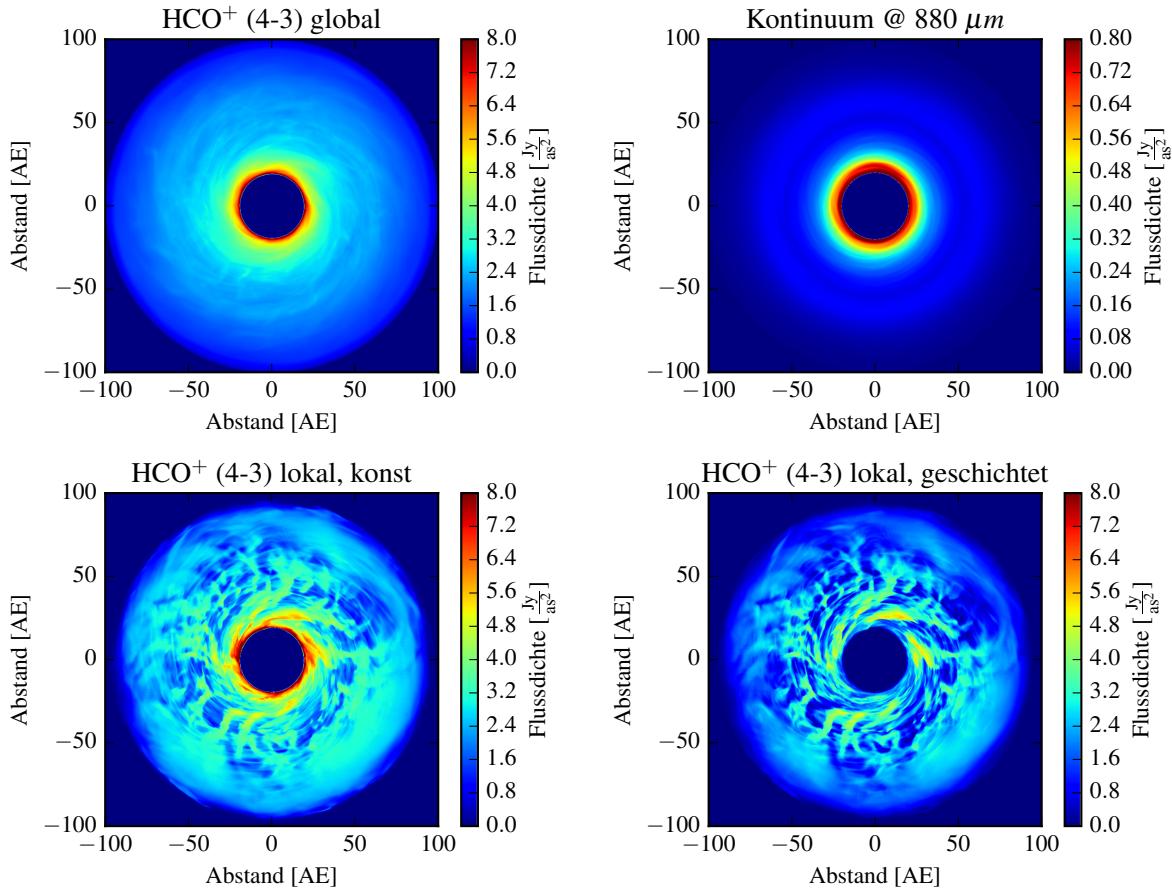


Abbildung 7.8 – Ideale HCO⁺ (4-3) Geschwindigkeitskarten bei $v = -250$ m/s für vier Scheibenmodelle, basierend auf dem D2G_e-2-Modell der MHD-Simulationen.

Oben links: *Globales* Modell, oben rechts: Kontinuum bei $\lambda = 880 \mu m$, unten links: *Lokales* Modell, unten rechts: *Lokales* Modell mit geschichteter HCO⁺-Verteilung.

ringen als die der Linie. Da das Geschwindigkeitsfeld auf die Kontinuumsstrahlung keinen Einfluss hat, kann eine symmetrische Lücke in der thermischen Reemission der Staubverteilung identifiziert werden. Dies ist mit den hier betrachteten Linienübergängen nicht möglich. Abbildung 7.9 zeigt, für einen quantitativen Vergleich der Modelle, einen radialen Schnitt durch die in Abbildung 7.8 dargestellten Flusskarten. Die turbulenten Zellen sind in den radialen Verläufen der beiden *lokalen* Modelle deutlich als tiefe Einschnitte zu identifizieren. Auch zeigt sich erneut, dass das geschichtete und ungeschichtete Modell (rot bzw. türkis dargestellt) bis auf den Innenrand qualitativ sehr vergleichbare radiale Verläufe aufweisen.

7.5 BEOBACHTBARKEIT TURBULENTER STRUKTUREN MIT ALMA

In diesem Abschnitt wird der Frage nachgegangen, unter welchen Voraussetzungen die turbulenten Strömungen, die zuvor in den idealen Geschwindigkeitskarten identifiziert werden konnten, beobachtet werden können. Zu diesem Zweck werden die

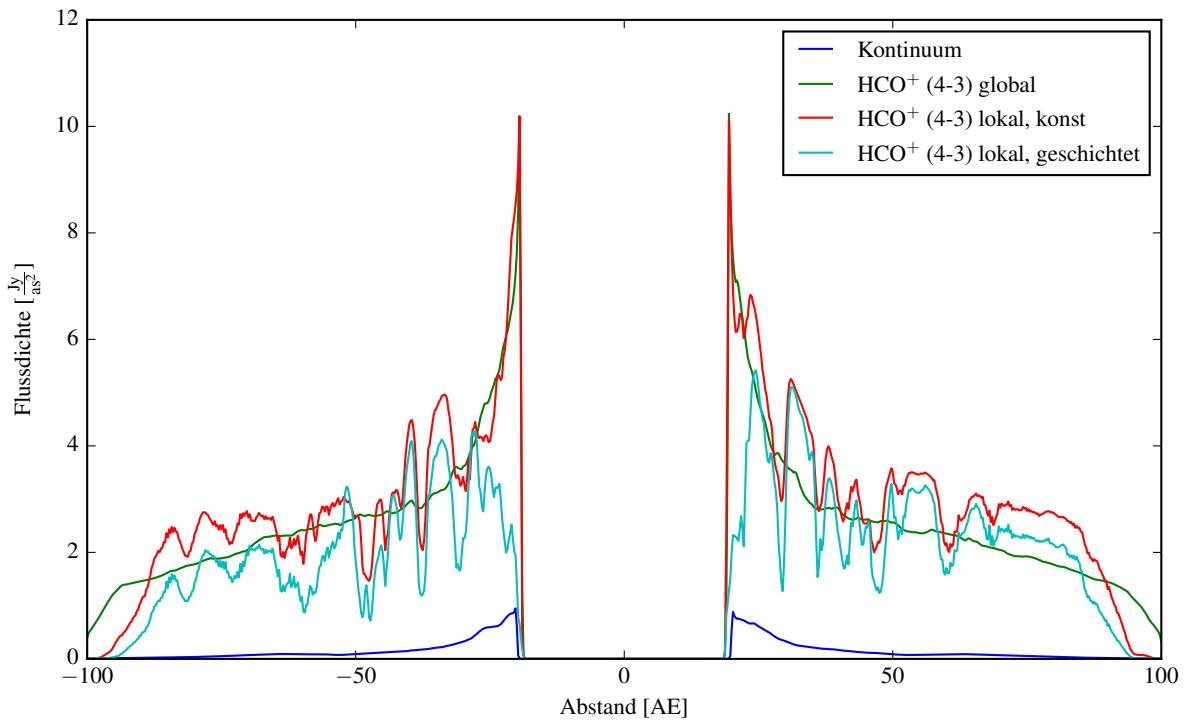


Abbildung 7.9 – Radialer Schnitt aller vier in Abbildung 7.8 dargestellten Flusskarten. Bis auf den inneren Rand zeigen die *lokalen* HCO⁺-Modelle mit geschichteter und konstanter Häufigkeitsverteilung qualitativ sehr vergleichbare Strukturen.

idealen Linienkarten genutzt, um mithilfe des CASA-Simulators realistische ALMA-Beobachtungen zu generieren.

Beschreibung der ALMA-Simulationen

Auch für diese Studie wird das CASA-Programm verwendet. Es wird wieder eine Beobachtungsdauer von drei Stunden angenommen unter Verwendung aller 50 Teleskope (12 m Durchmesser), die ALMA in der finalen Ausbaustufe bieten wird. Weiter werden wieder die empfohlenen Werte für das Niederschlagswasser (PWV) verwendet, um das thermische Rauschen zu simulieren. Die verwendeten Werte sind in Tabelle 6.4 gelistet. Die weiteren Details zur CASA-Software und zur Vorgehensweise sind in Abschnitt 2.3.2 dargestellt.

Anzumerken ist, dass im Rahmen dieser Studie die allgemeine Machbarkeit der vorgeschlagenen Beobachtungen demonstriert wird. Für ein spezifisches Objekt kann es nötig sein, die Beobachtungsparameter entsprechend anzupassen.

Ergebnis der simulierten Linienbeobachtung

Um die Beobachtbarkeit von turbulenten Strömungen mithilfe von Molekülinien nachzuweisen, wird der HCO⁺ (4-3) Übergang des D2G_e-2-Modells mit geschich-

Entfernung [pc]	Auflösung [as]	Basislinie [km]	Konfiguration
10	~ 1	0.21	2 (~ 0.23 km)
50	~ 0.2	1.06	11 (~ 1.04 km)
75	~ 0.13	1.59	14 (~ 1.62 km)
100	~ 0.1	2.12	16 (~ 2.30 km)
140	~ 0.07	2.96	19 (~ 3.1 km)

Tabelle 7.3 – Benötigte ALMA-Konfigurationen um die diskutierten turbulenten Strömungszellen (~ 10 AE Ausdehnung) für verschiedene Objektentfernungen auflösen zu können.

teter Molekülverteilung sowie der turbulenten Geschwindigkeit nach dem *lokalen* Modell verwendet. Dies ist dadurch begründet, dass dieses Modell das am stärksten physikalisch motivierte der hier betrachteten Modelle ist.

Das Hauptproblem dieser Beobachtungen ist, dass zum einen eine hohe räumliche Auflösung benötigt wird, um die Strömungen identifizieren zu können. Zum anderen wird aber auch eine hohe spektrale Auflösung ($\Delta v = 50$ m/s in dieser Studie) benötigt, da die Strömungen abhängig von der betrachteten Frequenz sind. Dies beides führt dazu, dass die Sensitivität des Instruments sehr niedrig ist, was zu einem schlechten Signal-zu-Rausch-Verhältnis führt. Es ergibt sich, dass für eine protoplanetare Scheibe in einer Entfernung von 140 pc (z. B. das Sternentstehungsgebiet im Sternbild des Stiers) unter diesen Voraussetzungen die simulierten Beobachtungskarten vom thermischen Rauschen dominiert werden und so keine Identifikation der turbulenten Strömungen möglich ist.

Daher wird in dieser Studie ein anderer Ansatz verfolgt. Aus den idealen Geschwindigkeitskarten konnte abgeleitet werden (Abschnitt 7.4.2), dass die lokalen turbulenten Strömungszellen eine Ausdehnung von ca. 10 AE aufweisen. Aus diesem Grund wird die räumliche Auflösung berechnet, die benötigt wird um 10 AE in typischen Entfernungen protoplanetarer Scheiben von 10 - 140 pc (z. B. 50 pc TW Hya [Wilner u. a. 2000], 75 pc [V4046 Sgr u. a., Öberg u. a. 2011], 140 pc [Butterfly-Stern u. a., Wolf 2003a]) aufzulösen. Aus diesen Ergebnissen wird dann die zu der benötigten Auflösung am besten passende ALMA-Konfiguration (vgl. Tabelle 7.3) ausgewählt und mit CASA die Beobachtung simuliert.

Das Ergebnis dieser Studie ist in der Abbildung 7.10 dargestellt. Dabei sind für jede betrachtete Objektentfernung jeweils zwei Karten mit negativer Geschwindigkeit dargestellt, die Bereiche der Scheibe zeigen, die sich auf den Beobachter zu bewegen. Jeweils zwei weitere Karten mit positiver Geschwindigkeit zeigen Bereiche der Scheibe, die sich vom Beobachter weg bewegen. Aus dem Vergleich zwischen den positiven und negativen Geschwindigkeiten lassen sich eindeutig lokale Strukturen erkennen, die als turbulente Strömungszellen identifiziert werden können. Exemplarisch ist wieder eine prominente Strömungszelle durch einen roten Kreis hervorgehoben. Es stellt sich heraus, dass diese lokalen Strukturen selbst bis zu einer Objektentfernung von ~ 100 pc mit einer Signifikanz von $> 3\sigma$ nachweisbar sind. Dies ist für

zukünftige Beobachtungen eine sehr spannende Erkenntnis, denn es ermöglicht die Überprüfung des zugrunde liegenden MHD-Modells und damit tiefgreifende neue Erkenntnisse über die wirkenden physikalischen Prozesse in protoplanetaren Scheiben zu gewinnen.

7.6 FAZIT

In dieser Studie wurden die folgenden Erkenntnisse gewonnen:

- Die Linien-Strahlungstransport-Simulationen zeigen, dass die Magnetorotationsinstabilität ein potenzieller Kandidat ist, um die benötigte Turbulenz zu erzeugen, die die beobachteten Linienbreiten erklären kann.
- Die Linienbreiten hängen stark von den lokalen physikalischen und chemischen Bedingungen der Scheibe ab und sind daher Funktionen der radialen sowie vertikalen Abstandes.
- Die durch die MRI ausgelöste Turbulenz manifestiert sich in hohen vertikalen Geschwindigkeiten in den obersten Schichten der Scheibe. Diese frequenzabhängigen Asymmetrien (turbulente Strömungszellen) können mit Moleküllini en in den räumlich aufgelösten Geschwindigkeitskarten nachgewiesen werden.
- Diese lokalen, durch die Turbulenz getriebenen Strömungen können durch Linien-Beobachtungen mit hoher räumlicher sowie spektraler Auflösung bis zu einer Objektentfernung von ca. 100 pc nachgewiesen werden. Allerdings wird dazu die maximale Leistungsfähigkeit (insbesondere die bestmögliche Sensitivität) von ALMA benötigt, die es erst in der finalen Ausbaustufe bieten wird.
- Durch die Beobachtung mit Molekülen unterschiedlicher chemischer Eigenchaften und Häufigkeitsverteilungen lässt sich die Turbulenz in den unterschiedlichen Scheibenschichten untersuchen.

Zum Schluss sei darauf hingewiesen, dass diese Studie auch zeigt, dass die Lücke in der Dichteverteilung, die im Kontinuum der thermischen Reemission des Staubs potenziell mit ALMA beobachtet werden kann [vgl. Abschnitt 4, [Flock u. a. 2015](#)], mithilfe der hier betrachteten Moleküllinien nicht eindeutig nachgewiesen werden kann. Aufgrund der turbulenten Bewegungen in den obersten Scheibenschichten wird die Lücke von der Linienemission und -absorption in diesen Bereichen verdeckt, was eine Lückendetektion erschwert. Auf der anderen Seite sind diese geschwindigkeitsabhängigen turbulenten Strömungen auch nicht durch Kontinuum-Beobachtungen nachweisbar.

Es wird möglich sein, mit einer einzelnen ALMA-Beobachtung alle vier hier betrachteten Rotationsübergänge simultan zu beobachten, was eine besonders effiziente Messung der Turbulenz in verschiedenen Scheibenschichten ermöglicht. Um weiter eine Aussage über die Staubverteilung und damit eine Aussage über die Wechselwirkung von Staub und Gas ableiten zu können, bietet es sich an, nur drei Moleküllinien, z. B.

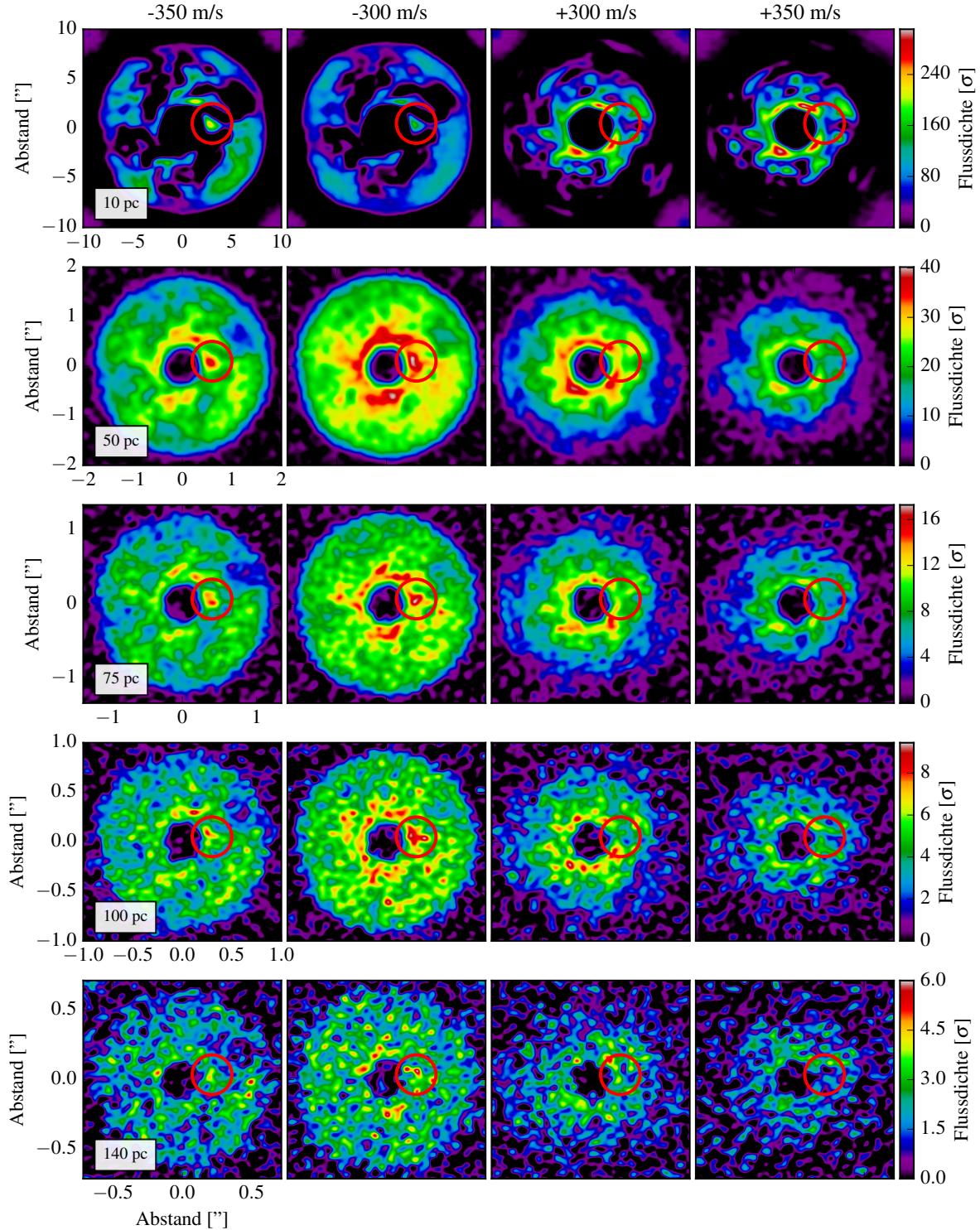


Abbildung 7.10 – Simulierte ALMA-Beobachtungen des HCO^+ (4-3) Übergangs für verschiedene Scheibenentfernungen (von oben nach unten ansteigend) und Geschwindigkeitskanäle. Die Flussdichte in Einheiten der Sensitivität σ ist durch die Farbskala gegeben. Die turbulenten Strömungszellen (exemplarisch ist eine mit dem roten Kreis markiert) sind bis zu einer Entfernung von ca. ~ 100 pc nachweisbar.

CO (3-2), CO (3-2) sowie HCO⁺ (4-3), und zusätzlich die Staub-Reemission bei einer Wellenlänge von $\lambda \approx 880 \mu\text{m}$ zu beobachten. Somit kann bereits durch eine einzelne geschickt vorbereitete ALMA-Beobachtung ein konsistentes Modell der Scheibe und ihrer physikalischen Eigenschaften erstellt werden, welches durch die in dieser Studie gezeigte Durchführbarkeit motiviert wird.

8

BEWERTUNG UND AUSBLICK

Diese Arbeit ist im Kontext von protoplanetaren Scheiben um junge, sonnenähnliche Sterne angesiedelt. Dabei ist die Beobachtung und Untersuchung der von charakteristischen Scheibeninhomogenitäten ausgesandten elektromagnetischen Strahlung von zentraler Relevanz, um die wirkenden physikalischen Prozesse während der verschiedenen Evolutionsphasen zu verstehen.

Zu diesem Zweck wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit das neue, vollständig parallelisierte Strahlungstransportprogramm *Mol3D* entwickelt, der Funktionsumfang vorgestellt und die korrekte Funktionsweise mithilfe von ausgewählten Vergleichssimulationen demonstriert. Da *Mol3D* quelloffen ist steht der Arbeitsgruppe *Stern- und Planetenentstehung* sowie jedem interessierten Astrophysiker somit eine moderne, effiziente und flexibel anpassbare Software mit einem breiten Funktionspektrum zur Verfügung.

In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass *Mol3D* in der Lage ist die Temperatur einer gegebenen komplexen Staubverteilung mithilfe der Monte-Carlo-Methode zu berechnen. Auf diesen Ergebnissen aufbauend können räumlich aufgelöste Flusskarten der Reemissionsstrahlung der Staubkomponente sowie der Streustrahlung dieser Staubverteilung simuliert werden. Durch die Verwendung des Stokes-Formalismus ist zusätzlich die Berechnung des linearen und zirkularen Polarisationsgrads sowie des Polarisationswinkels möglich. Die Kombination mit der implementierten Peel-off-Technik ermöglicht dabei die effiziente Berechnung der einzelnen Stokes-Komponenten. Lohnenswert erscheint die Erweiterung des vorhandenen Strahlenverfolgungsalgorithmus, um die Streustrahlung auch im Submillimeter-Wellenlängenbereich effizient berechnen zu können. Auch kann die Polarisation aufgrund von ausgerichteten elongierten Staubteilchen mit implementiert werden. Dies erlaubt die Vermessung der globalen (und lokalen) Magnetfelder in Bok-Globulen oder auch protoplanetaren Scheiben.

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt allerdings auf der Simulation von Rotationsübergängen von Molekülen, die bereits in protoplanetaren Scheiben nachgewiesen wurden. Im Gegensatz zu der Beobachtung der Staubkomponente, die hauptsächlich eine Aussage über die Dichtestruktur der Scheibe zulässt, ermöglicht die Beobachtung der Gaskomponente eine Aussage über die chemische Zusammensetzung und Schichtung sowie über die (lokale) Dynamik der Scheibe. Dazu ist *Mol3D* in der Lage räumlich und spektral aufgelöste Geschwindigkeitskarten sowie Spektren von derzeit sieben verschiedenen Molekülen zu berechnen. Die notwendige Berechnung der

Besetzungszahlen kann, je nach Anwendungsgebiet, mit einer der drei genäherten Methoden realisiert werden. Für die praktischen Anwendungen im Kontext der protoplanetaren Scheiben hat sich besonders die LVG-Methode bewährt. Sollen jedoch in Zukunft allgemeinere, komplexe Dichteverteilungen (z. B. Bok-Globulen, Sternhüllen usw.) mit *Mol3D* modelliert werden, so sollte die Berechnung der Besetzungszahlen generalisiert werden (z. B. durch einen Monte-Carlo-Algorithmus) und kein anwendungsspezifisches genähertes Verfahren verwendet werden. Ergänzend erscheint es lohnenswert die Aufspaltung der Moleküllinien durch den Zeeman-Effekt zu implementieren, um eine weitere, unabhängige Vermessung der wirkenden Magnetfelder zu ermöglichen.

Im zweiten Teil der Arbeit wurde *Mol3D* verwendet, um die Frage zu beantworten, unter welchen Voraussetzungen es möglich ist, durch Beobachtungen von Rotationsübergängen Scheibeninhomogenitäten nachzuweisen. Dazu wurden zwei Studien vorgestellt.

In der ersten Studie wurde auf Basis von Hydrodynamik-Simulationen gezeigt, dass Scheibenlücken, die durch die Interaktion eines Planeten mit der Scheibe hervorgerufen werden, in idealen räumlich aufgelösten Geschwindigkeitskarten sowie in simulierten ALMA-Beobachtungen nachweisbar sind. Allerdings konnte gezeigt werden, dass die Identifikation der Lücken insbesondere bei massereichen protoplanetaren Scheiben mit typischen Ausdehnungen (> 100 AE) signifikant von der Wahl des Moleküls abhängt, mit welchem die Beobachtung durchgeführt wird. So ist insbesondere mit den CO-Übergängen im (Sub-)Millimeter aufgrund der hohen optischen Tiefe nur die Scheibenoberfläche beobachtbar, die durch den Einfluss des Planeten kaum gestört ist. Die Lücke kann in diesem Fall nur mit Rotationsübergängen von Molekülen mit geringerer Häufigkeit (z. B. CS oder HCO⁺) und auch in diesen Fällen oft nur in den Linienflügeln beobachtet werden. In Kombination mit komplementären Beobachtungen der Staubkomponente ist es somit besonders für masseärmere protoplanetare Scheiben möglich die Wechselwirkung von Staub und Gas in den potenziellen Planetenentstehungsgebieten zu studieren.

Aufgrund von räumlich unaufgelösten Molekülbeobachtungen, theoretischen Ansätzen und Simulationen wird vermutet, dass protoplanetare Scheiben hochgradig turbulent sind, auch wenn der Ursprung der Turbulenz bis heute nicht im Detail geklärt ist. Im letzten Kapitel dieser Arbeit wurde daher der Fragestellung nachgegangen, ob die aus Magnetohydrodynamik-Simulationen aufgrund der Magnetorotationsinstabilität vorhergesagten lokalen turbulenten Strömungen potenziell mit ALMA beobachtbar sind. Diese dynamischen Strukturen sind durch den Doppler-Effekt nur durch Linienbeobachtungen und nicht im Kontinuum nachweisbar. Im Rahmen dieser Arbeit konnte exemplarisch gezeigt werden, dass ALMA dazu bis in einer Objektentfernung von ca. 100 pc in der Lage sein wird. Da die Turbulenz in den obersten Scheibenschichten besonders ausgeprägt ist, bieten sich, im Kontrast zu der Suche nach Scheibenlücken, besonders die Übergänge des CO-Moleküls an. Eine Kombination mit Beobachtungen weiterer Molekülübergänge wie z. B. denen des HCO⁺-Moleküls erlaubt zudem die Vermessung der Turbulenz in unterschiedlichen Scheibenschichten. Diese vorgeschlagenen Beobachtungen sind daher potenziell in der Lage das Verständnis über den Ursprung der Turbulenz in protoplanetaren Scheiben signifikant zu verbessern.

Teil IV
APPENDIX

A

WEITERFÜHRENDE DETAILS ZU MOL₃D

A.1 ENTWICKLUNGSGESCHICHTE

Anfänglich war angedacht, entweder MC₃D um den Linien-Strahlungstransport zu erweitern, oder alternativ ein reines Linien-Strahlungstransportprogramm zu entwickeln. Benötigte Eingabewerte, wie die Temperaturstruktur oder die Moleküldichte sollten dann aus MC₃D oder anderen externen Programmen eingelesen werden.

Der erste Ansatz wurde relativ schnell verworfen, da MC₃D für eine solch grundlegende Erweiterung nicht ausgelegt ist und aufgrund der vorhandenen Programmstrukturen auch eine angedachte Parallelisierung nicht ohne erheblichen Aufwand realisierbar ist. So wurde zunächst entschieden, ein reines Linien-Strahlungstransportprogramm (*Mol₃D*) zu entwickeln, welches sich auf die Erfahrungen mit dem URAN-(IA)-Softwarepaket (siehe Kapitel 3.4.3) stützt. Die Gitterstruktur von MC₃D sollte jedoch beibehalten werden, um einen einfachen Übertrag der Temperatur- und Dichtestruktur zu ermöglichen.

Allerdings ist bereits nach den ersten Entwicklungen und Prototypen abzusehen gewesen, dass diese Vorgehensweise zu Doppelstrukturen führt und somit einer effizienten und in der Praxis anwendbaren Lösung im Wege steht. Insbesondere der Übertrag der benötigten Temperaturstruktur, die aufgrund der guten Durchmischung in protoplanetaren Scheiben aus der Staubtemperatur abgeleitet werden kann, erwies sich als sehr unpraktikabel. Daher wurde beschlossen, einen besonders effizienten Algorithmus für den Kontinuum-Strahlungstransport in *Mol₃D* zu implementieren, der auf den langjährigen Erfahrungen mit MC₃D basiert. Aus diesem Grund sind einige Algorithmen, insbesondere diese, die die Behandlung des Staubs beschreiben, von MC₃D nach *Mol₃D* übertragen worden. Sie wurden für die neue gekapselte Programmstruktur angepasst, vielfach optimiert und auf ihre korrekte Funktionsweise getestet. Somit umfasst *Mol₃D* neben dem Linien-Strahlungstransport das Funktionsspektrum von MC₃D.

Für die Zukunft ist geplant, dass *Mol₃D* in immer mehr astrophysikalischen Anwendungen (in erster Linie im Kontext der protoplanetaren Scheiben) verwendet wird, für die bisher MC₃D eingesetzt wurde.

A.2 BEZUG UND VERWENDUNG

Um die Entwicklung des Programms übersichtlich und transparent zu halten und den Quelltext für viele Entwickler gleichzeitig zugänglich zu machen, ist für *Mol3D* von Anfang an die Versionsverwaltung *Git*¹ verwendet worden. Dies hat den entscheidenden Vorteil, dass die Programmbasis für alle Entwickler und Anwender gleich ist, Fehler zurückverfolgt werden können und Updates umgehend zur Verfügung stehen.

Weiter ist *Mol3D* unter der Open-Source-Lizenz *GNU GPLv3* frei zugänglich² und jeder interessierte Benutzer ist eingeladen, *Mol3D* für seine Zwecke zu verwenden, gegebenenfalls anzupassen und zu erweitern. Um *Mol3D* zu beziehen ist eine funktionierende *Git* Installation notwendig. Ist dies gegeben kann die aktuellste stabile Version von *Mol3D* mit

```
> git clone https://github.com/florianober/Mol3D
```

heruntergeladen und beispielsweise mit

```
> make C0=para FC=ifort new
```

kompiliert werden. Es werden die Compiler *Intel® Fortran* und *GFortran* unterstützt. Weitere Informationen zur Installation finden sich in der mitgelieferten README-Datei. *Mol3D* wurde erfolgreich auf verschiedenen Linux-Distributionen (Arch Linux, OpenSUSE, Ubuntu, Red Hat, Debian) getestet. Es wird dabei vorausgesetzt, dass eine funktionierende Installation der *cfitsio*-Bibliothek³ auf dem System vorhanden ist. Zusätzlich zu dem in *Fortran* geschriebenen reinen Strahlungstransportprogramm wird *Mol3D* mit Visualisierungsprogrammen bereitgestellt, die in der freien Skriptsprache *Python 3* geschrieben sind. Damit wird gewährleistet, dass dem neuen Benutzer die Bedienung und erste Datenauswertung erleichtert und die Einarbeitungszeit in das neue Programm deutlich verkürzt wird.

Mol3D speichert alle Strahlungskarten (Streu- und Reemissionskarten, Linienkarten) in dem in der Astronomie häufig verwendeten, effizienten *Fits*-Format. Die Ergebnisse der Simulationen sind daher mit gängigen Bildbetrachtungsprogrammen wie *DS9*⁴ auch ohne die Verwendung der zur Verfügung gestellten Skripte einsehbar. Auch die Datenauswertung mit eigenen Programmen oder beispielsweise die Simulation von ALMA-Beobachtungen mithilfe der *CASA*-Software (vergleiche hierzu die Kapitel 6 und 7 im dritten Teil dieser Arbeit), ist daher ohne Weiteres realisierbar.

A.3 UNTERSUCHUNG DER LAUFZEIT

In diesem Abschnitt soll die Laufzeit, die nötig ist, um die Temperatur einer protoplanetaren Scheibe zu berechnen, mit der von MC3D verglichen werden. Dazu

¹ <https://git-scm.com/>

² <https://github.com/florianober/Mol3D>

³ <http://fits.gsfc.nasa.gov/>

⁴ <http://ds9.si.edu/>

wird die aktuellste MC₃D-Version (4.025) verwendet, in die viele Erkenntnisse aus der Entwicklung von *Mol₃D* zurückgeflossen⁵ sind. Daher ist diese Version deutlich schneller als die Vorgängerversionen, wobei aufgrund der kontinuierlichen Weiterentwicklung keine quantitative Aussage über die tatsächliche Geschwindigkeitssteigerung getroffen werden kann.

Ein Vergleich der Laufzeiten ist aufgrund der leicht unterschiedlichen Monte-Carlo-Implementierungen und -Algorithmen komplex. Daher wird zu Vergleichszwecken eine Testscheibe angenommen und eine Referenz-Temperaturverteilung für eine große Photonenanzahl mit *Mol₃D* berechnet. Es wird dabei angenommen, dass die resultierende Temperaturverteilung im Rahmen der Numerik der gesuchten Lösung entspricht und eine Erhöhung der Photonenanzahl keine weitere Veränderung der Temperatur bewirkt. Im Anschluss wird die Zeit gemessen, die beide Programme benötigen, um ein reduziertes χ^2 (siehe auch Gleichung A.1) zu erhalten:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei entspricht O_i der mit *Mol₃D* oder MC₃D berechneten i-ten Temperatur im Modellraum und E_i der analogen Temperatur der Referenzsimulation. Praktisch wird ein χ^2 -Wert durch die Vorgabe einer Photonenanzahl erzeugt und die Laufzeit gemessen. Das Ergebnis dieses Experiments ist in Abbildung A.1 dargestellt.

Die Abbildung zeigt, dass *Mol₃D* bei identischer Laufzeit deutlich bessere Ergebnisse liefert als MC₃D. Für dieses Modell ist es im Hinblick auf die Genauigkeit vier bis sechs mal schneller als MC₃D. Allerdings ist dieses Vorgehen nur genau dann gültig, wenn die resultierende Temperaturverteilung beider Programme mit steigender Anzahl an Photonen gegen die Temperatur der Referenzsimulation konvergiert. Dass diese Annahme gültig ist, wurde bereits in Abschnitt 5.2 gezeigt. Die Ergebnisse dieses Tests zeigen zudem, dass eine sehr gute Übereinstimmung ($\chi^2 \lesssim 10$) mit beiden Programmen realisierbar ist. Mit anderen Worten: Die Temperaturverteilungen, die mit beiden Programmen berechnet werden, konvergieren jeweils gegen die Lösung der Referenzsimulation.

A.4 EFFEKTIVITÄT DER PARALLELISIERUNG

Heutzutage nimmt die Leistung moderner Ein-Kern-CPUs nicht mehr in dem Maße zu, wie noch vor einigen Jahren. Eine Verbesserung der Leistungsfähigkeit wird hauptsächlich durch die Erhöhung der Anzahl der Kerne auf einer einzelnen CPU-Platine erreicht. Daher ist es von großer Bedeutung, diese verfügbare Leistung effizient zu nutzen. Dies erfordert eine vorausschauende und sorgfältige Programmierung (insbesondere eine Kapselung der Daten), um z. B. kritische Wettläufe⁶ zu vermeiden. Vor allem dann, wenn es der parallelisierte Algorithmus erfordert, dass auf gemeinsame Speicherbereiche zugegriffen und geschrieben werden muss. Bei *Mol₃D* ist dies

⁵ engl.: backport

⁶ engl.: race-condition

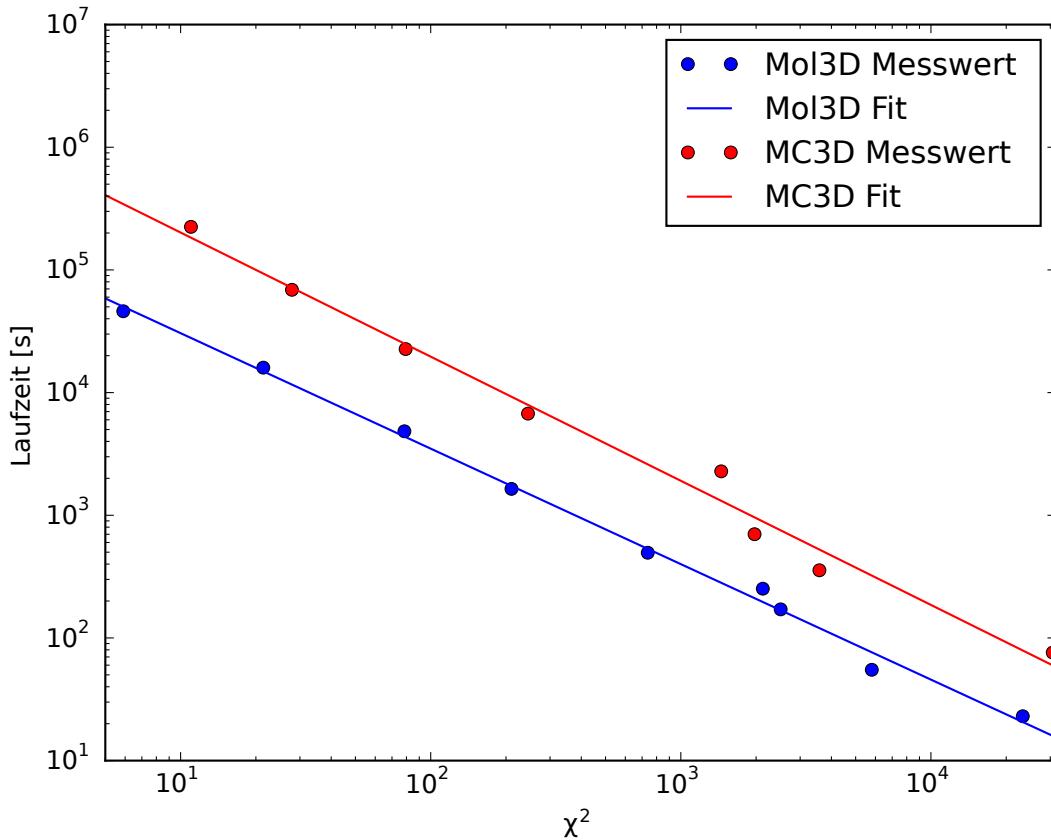


Abbildung A.1 – Vergleich der Berechnungsgeschwindigkeiten zwischen *Mol3D* und *MC3D* für eine typische Temperaturverteilung. Auf der y-Achse ist die Zeit dargestellt, die das jeweilige Programm benötigt, um ein zugehöriges χ^2 (x-Achse) zu erreichen. Die Punkte repräsentieren die gemessenen Zeiten (blau für *Mol3D* und rot für *MC3D*) und die Linien zeigen die zugehörige beste Anpassung.

beispielsweise bei der Temperaturberechnung erforderlich. Zwar wird jedes Photon für sich als eigenständiges (gekapseltes) Objekt behandelt, allerdings muss jedes Photonenpaket die aktuelle Temperatur der aktuellen Zelle kennen und diese aufgrund der eingebrachten Energie auch erhöhen können. Dazu sind die Zugriffe auf diese Speicherbereiche entsprechend zu schützen. In diesem Abschnitt wird die Effektivität der Parallelisierung von *Mol3D* kurz vorgestellt.

Grundsätzlich gibt es in *Fortran* zwei Methoden zur Parallelisierung. Zum einen MPI⁷, welches darauf basiert, dass Nachrichten zwischen den einzelnen Prozessen ausgetauscht werden. Der große Vorteil ist, dass MPI zwischen verschiedenen vernetzten Computersystemen arbeiten kann und damit die Anzahl der Kerne (entspricht hier der Anzahl der Prozesse) nur durch die Anzahl der zusammengeschalteten Computer limitiert ist. Allerdings ist der Kommunikationsaufwand nicht unerheblich und die Implementierung daher aufwendig und fehleranfällig.

In *Mol3D* sind die zeitaufwendigsten Schleifen daher unter der Verwendung von

⁷ engl.: Message Passing Interface

OpenMP parallelisiert. OpenMP parallelisiert im Gegensatz von MPI nicht den gesamten Prozess, sondern verfolgt einen anderen Ansatz. Es unterteilt vorhandene Schleifenstrukturen mithilfe von einzelnen Threads, die dann auf die zur Verfügung stehenden CPU-Kerne aufgeteilt und abgearbeitet werden. Aus diesem Grund ist OpenMP für einzelne Computer mit einem gemeinsamen Hauptspeicher gedacht. Durch die steigende Anzahl an Kernen auf einem Chip, sowie die vergleichsweise einfache Implementierung, bietet sich diese Methode hier an und wurde daher für *Mol3D* verwendet.

Um die Effektivität der Parallelisierung zu messen, wird zunächst eine Vergleichssimulation erstellt. Der Einfachheit halber wird zu diesem Zweck dieselbe Testsimulation des vorhergehenden Abschnittes 5.2 verwendet. Gemessen wird die Zeit, die *Mol3D* für einen typischen kompletten Durchlauf benötigt. Konkret umfasst dies die Berechnung der Temperaturverteilung, der Besetzungszahlen unter Verwendung der LVG-Methode, sowie die Berechnung des CO (3-2) Linienspektrums und der Staub-Reemissionskarten. Dies entspricht dem Standardgebrauch des Programms, wie es im täglichen Arbeitseinsatz benutzt wird und vernachlässigt daher nicht die seriellen Anteile des Programmdurchlaufs.

Es wird pro Anzahl der Kerne für jeweils fünf Durchläufe die Laufzeit gemessen und anschließend die Geschwindigkeitssteigerung s_n in Abhängigkeit der Anzahl der verwendeten Kerne berechnet. Sie ist hier definiert als:

$$s_n = \frac{T_1}{T_n}, \quad (\text{A.2})$$

wobei T_n für die Laufzeit auf n CPU-Kernen steht. T_1 bezeichnet dementsprechend die Laufzeit auf nur einem Kern und beträgt ca. 49 Stunden.

Das Ergebnis der Simulation ist in Abbildung A.2 dargestellt. Auf der Abszisse ist die Anzahl der verwendeten CPU-Kerne aufgetragen. Die Ordinate beschreibt die jeweilige Geschwindigkeitssteigerung. Aus der berechneten Ausgleichsgeraden geht hervor, dass die Effektivität der Parallelisierung von *Mol3D* dem Ideal mit einer Geschwindigkeitssteigerung von $s_{16} = 15.79$ für 16 Kerne für diese komplexe Simulation sehr nahe kommt. Zur besseren Übersicht ist der Fehler auf 3σ skaliert.

Dass der Fehler mit steigender Kernanzahl zunimmt, liegt vor allem in der Temperaturberechnung begründet. Aufgrund der Verwendung der Monte-Carlo-Methode und der nicht vorhersagbaren Aufteilung der Photonen auf die einzelnen Threads, sind die Photonenpfade in zwei Durchläufen nicht identisch. Damit variiert die eingetragene Energie von Durchlauf zu Durchlauf und somit auch die optischen Eigenschaften des Systems. Dies hat wiederum direkte Auswirkungen auf den Pfad und die Wellenlänge der einzelnen Photonen. Aus diesem Grund kann es vorkommen, dass für einen einzelnen Durchlauf auf mehr als einem Kern die Geschwindigkeitssteigerung höher als das Ideal ist. Dieses Problem zieht konsequenterweise nach sich, dass die Abweichung mit Erhöhung der Kernanzahl zunimmt.

Aufgrund der Funktionsweise von OpenMP und der heutzutage limitierten Verfügbarkeit von Computersystemen mit mehr als 16 Kernen und geteiltem Speicher, wird an dieser Stelle auf eine genauere Untersuchung mit mehr Kernen verzichtet. Anzu-

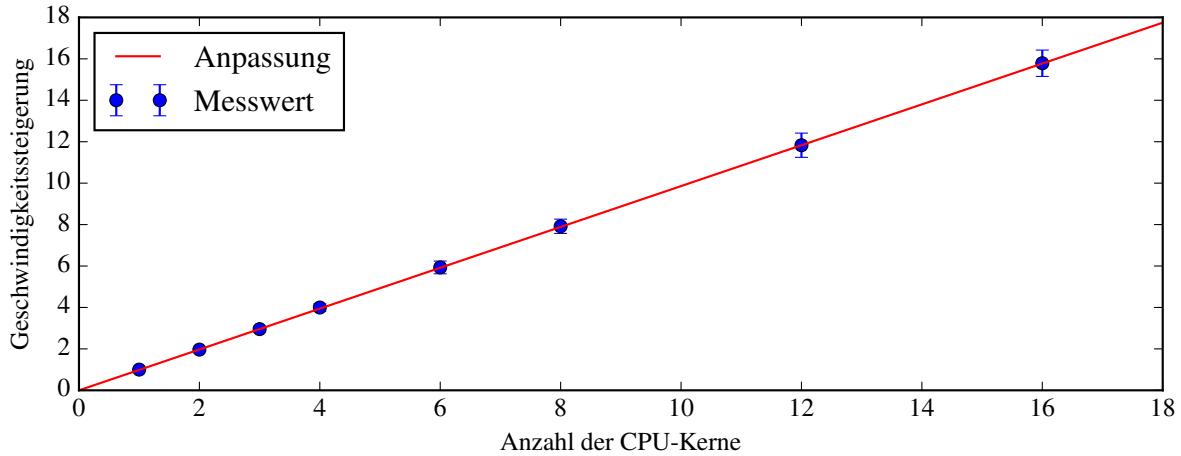


Abbildung A.2 – Effizienz der Parallelisierung von *Mol3D* mit OpenMP. Die gemessene Geschwindigkeitssteigerung ist nahezu ideal und beträgt für dieses konkrete Scheibenmodell $s_{16} = 15.79$ bei der Verwendung von 16 CPU-Kernen.

merken ist, dass der serielle Anteil von *Mol3D* (insbesondere bei der Temperaturberechnung) hauptsächlich in der Anzahl der verwendeten Photonen begründet liegt. Je mehr Photonen betrachtet werden (entspricht einer längeren Laufzeit), desto geringer ist der serielle Anteil.

Anmerkung: Die in *Mol3D* implementierte Methode zur Berechnung der Staubtemperatur verhindert eine effiziente Parallelisierung auf sehr vielen Kernen, da die Information über die aktuelle Energie in der Zelle zu jedem Zeitpunkt für jeden Thread zur Verfügung stehen muss. Daher werden diese Zellen während einer Interaktion vor dem Zugriff eines weiteren Threads gesichert, um falschen Ergebnissen vorzubeugen.

Um dieses Problem zu umgehen wurde z. B. von [Robitaille \[2011\]](#) vorgeschlagen, auf die Temperaturkorrektur nach [Bjorkman und Wood \[2001\]](#) zu verzichten und wieder auf die ursprünglich von [Lucy \[1999b\]](#) vorgestellte Methode zu wechseln. Bei dieser Methode bleibt die Temperatur in den Zellen für eine Iteration konstant, wodurch die Parallelisierung deutlich effizienter gestaltet werden kann. Als zusätzlicher Vorteil dieser Vorgehensweise können so auch temperaturabhängige Staubopazitäten [z. B. Olivin und Enstatite [Zeidler u. a. 2015](#)] mit berechnet werden.

Da *Mol3D* zur Zeit nur OpenMP zur Parallelisierung nutzt und daher auf die Anzahl der Kerne auf einem Computersystem beschränkt ist, wurde bisher auf diese Methode verzichtet.

A.5 WAHL DES ZUFALLSZAHLENGENERATORS

Abschließend werden in diesem Abschnitt die Zufallszahlengeneratoren, welche in *Mol3D* implementiert sind und in Abschnitt 3.4.1 ausführlich eingeführt wurden, vorgestellt und getestet (siehe auch Tabelle A.1). Dabei bezeichnet CONG einen sehr ein-

fachen linearen Kongruenzgenerator mit den Parametern $a = 69096$, $b = 1327217885$, sowie dem Modulo $m = 2^{32}$. Dieser ist gleichzeitig Bestandteil des KISS-Generators (Version 1999)⁸.

Es wird ein Vergleich der Laufzeiten, sowie eine elementare Überprüfung ihrer Güte, bzw. der korrekten Implementierung, durchgeführt. Dieser stellt sicher, dass die Ergebnisse der zukünftigen Simulationen nicht durch statistische Fehler beeinflusst sind, die sich allein aus der inkorrekt Wahl bzw. Implementierung des Zufallszahlengenerators ergeben, da beispielsweise die errechneten Zahlen nicht statistisch unabhängig sind.

Dazu werden jeweils $N = 10^9$ Zufallszahlen im halboffenen Intervall $[0, 1)$ erzeugt und die Laufzeit gemessen. Im Anschluss werden der Mittelwert sowie die Standardabweichung der Gleichverteilung berechnet und ein χ^2 -Test (vgl. Formel A.1) durchgeführt. Alle der implementierten Generatoren sind in der Lage den Mittelwert (0.5) und die Standardabweichung ($1/\sqrt{12}$) der Verteilung im Rahmen des statistischen Fehlers zu reproduzieren.

Weiter sind die Ergebnisse der Laufzeit und die des durchgeföhrten χ^2 -Tests bei einer Anzahl von $k = 13$ gleich breiten Kanälen in der Tabelle A.1 verzeichnet. Dabei bezeichnet O_i in Gleichung A.1 die Anzahl der beobachteten Zahlen im i-ten Intervall und $E_i = N/k$ die Anzahl der für dieses Intervall erwarteten Zahlen. Ist χ^2 sehr viel größer ($\chi^2 \gg 10$), so teilen sich die erzeugten Zahlen nicht gleichmäßig über das Intervall auf.

Auf der anderen Seite ist ein sehr kleiner Wert ($\chi^2 \ll 10$), welcher einer nahezu perfekten Übereinstimmung entsprechen würde, auch kein qualitatives Merkmal, denn dies ließe den Rückschluss zu, dass sich die Zahlen perfekt in bestimmten Abständen (Ebenen) anordnen, die im Einklang mit den betrachteten Kanälen stehen und damit eine Ordnung aufweisen. Dieses Problem ist insbesondere bei den linearen Kongruenzgeneratoren bekannt [Tezuka u. a. 1993] und wird durch die vorliegenden Ergebnisse bestätigt.

Da an dieser Stelle keine ausführliche Qualitätsstudie der (Pseudo-) Zufallszahlengeneratoren durchgeföhrt werden kann und nur die korrekte Implementierung des Algorithmus sichergestellt werden soll, sei auf die ausführliche TestU01-Bibliothek [L'Ecuyer und Simard 2007] verwiesen.

Die Güte des Generators spielt bei statistischen Experimenten eine tragende Rolle. Daher und aufgrund der sehr hohen Geschwindigkeit, die sich aus dem eleganten Algorithmus ergibt, ist der KISS-Generator standardmäßig in *Mol3D* voreingestellt. Letztendlich erzeugen alle implementierten Generatoren Zufallszahlen, die grundsätzlich für die hier vorgestellten astrophysikalischen Monte-Carlo-Simulationen im Kontext der protoplanetaren Scheiben ausreichend sind.

Wie in Abschnitt 3.4.1 beschrieben, ist die Wahl der Saat zur Initialisierung des Zufallszahlengenerators nicht unkritisch. Um dieses Problem zu umgehen, wird jeder in *Mol3D* implementierte Generator durch ganzzahlige Zufallszahlen initialisiert, die mit dem CONG-Generator berechnet werden. Dieser wiederum wird durch eine Saat

⁸ George Marsaglia hat seinen KISS-Algorithmus über die Jahre immer wieder angepasst, aber den Namen beibehalten.

Algorithmus	Laufzeit [s]	χ^2
CONG	9.1	1.1
Mersenne Twister	18.2	10.1
TAUS88	10.9	5.4
LFSR113	11.9	11.4
KISS	11.4	11.4

Tabelle A.1 – Pseudozufallszahlengeneratoren im Überblick. Es wurden $N = 10^9$ Zufallszahlen erzeugt, die Laufzeit gemessen und ein χ^2 -Test durchgeführt.

in Abhängigkeit der verwendeten Anzahl von Threads initialisiert, um statistisch unabhängige Zufallszahlen bei paralleler Ausführung zu garantieren.

A.6 VERGLEICH MIT SEMENOV U. A. 2008

In Abschnitt 5.4.1 wurde der Linien-Strahlungstransport von *Mol3D* mit den Ergebnissen der Studie von [Semenov u. a. 2008] verglichen. Zur besseren Vergleichbarkeit ist an dieser Stelle das dort verwendete Scheibenmodell (Abbildung A.3) sowie das jeweilige Ergebnis (Abbildung A.4) dargestellt.

A.7 VOLLSTÄNDIGE FLUSSKARTEN

Abschließend sind an dieser Stelle die vollständigen Fluss- und Geschwindigkeitskarten angehängt, die die vorangegangenen Studien in den Kapiteln 6 und 7 ergänzen.

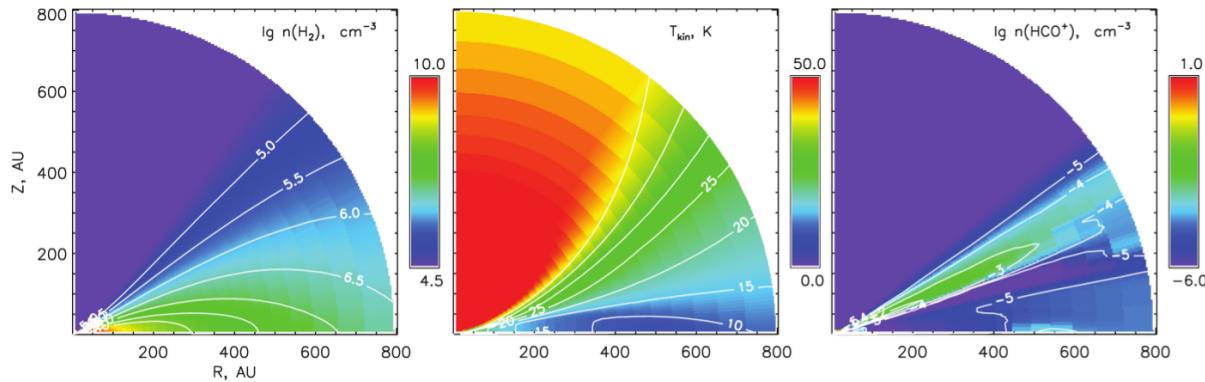


Abbildung A.3 – Abbildung 1 der Studie von Semenov u.a. [2008]. Dargestellt ist das verwendete Scheibenmodell, links die DichteVerteilung, in der Mitte die TemperaturVerteilung und rechts die relative Molekülhäufigkeit.

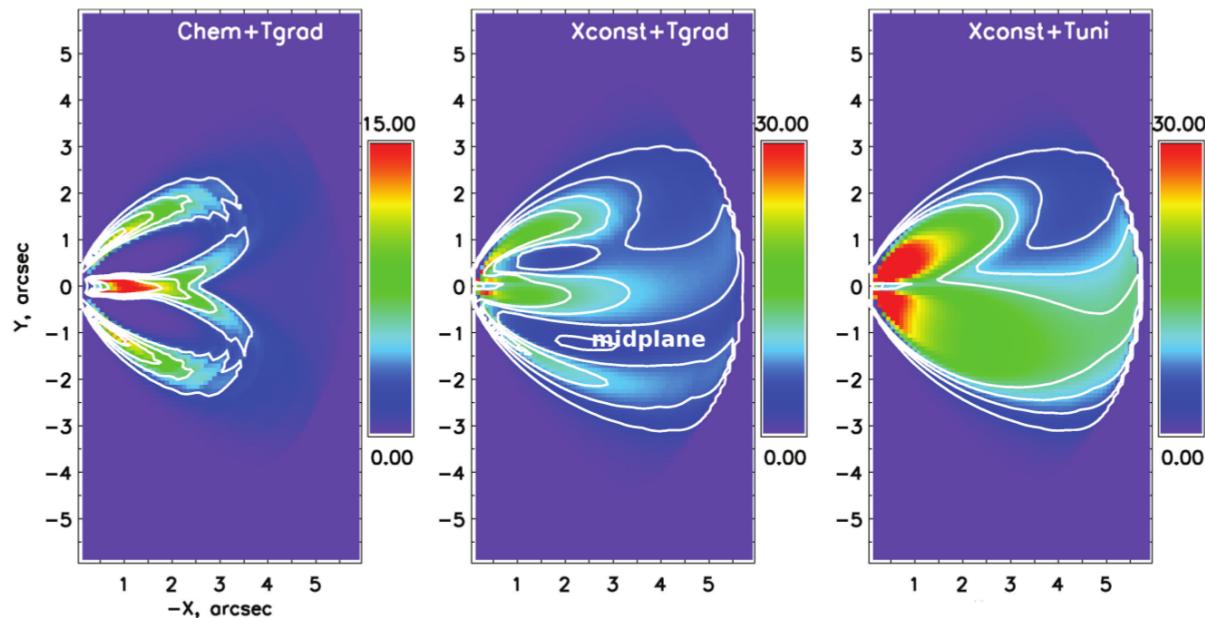


Abbildung A.4 – Abbildung 2 der Studie von Semenov u.a. [2008]. Dargestellt ist die $v = +0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskarte für jeweils ein Scheibenmodell. Für weitere Details siehe Abschnitt 5.4.1.

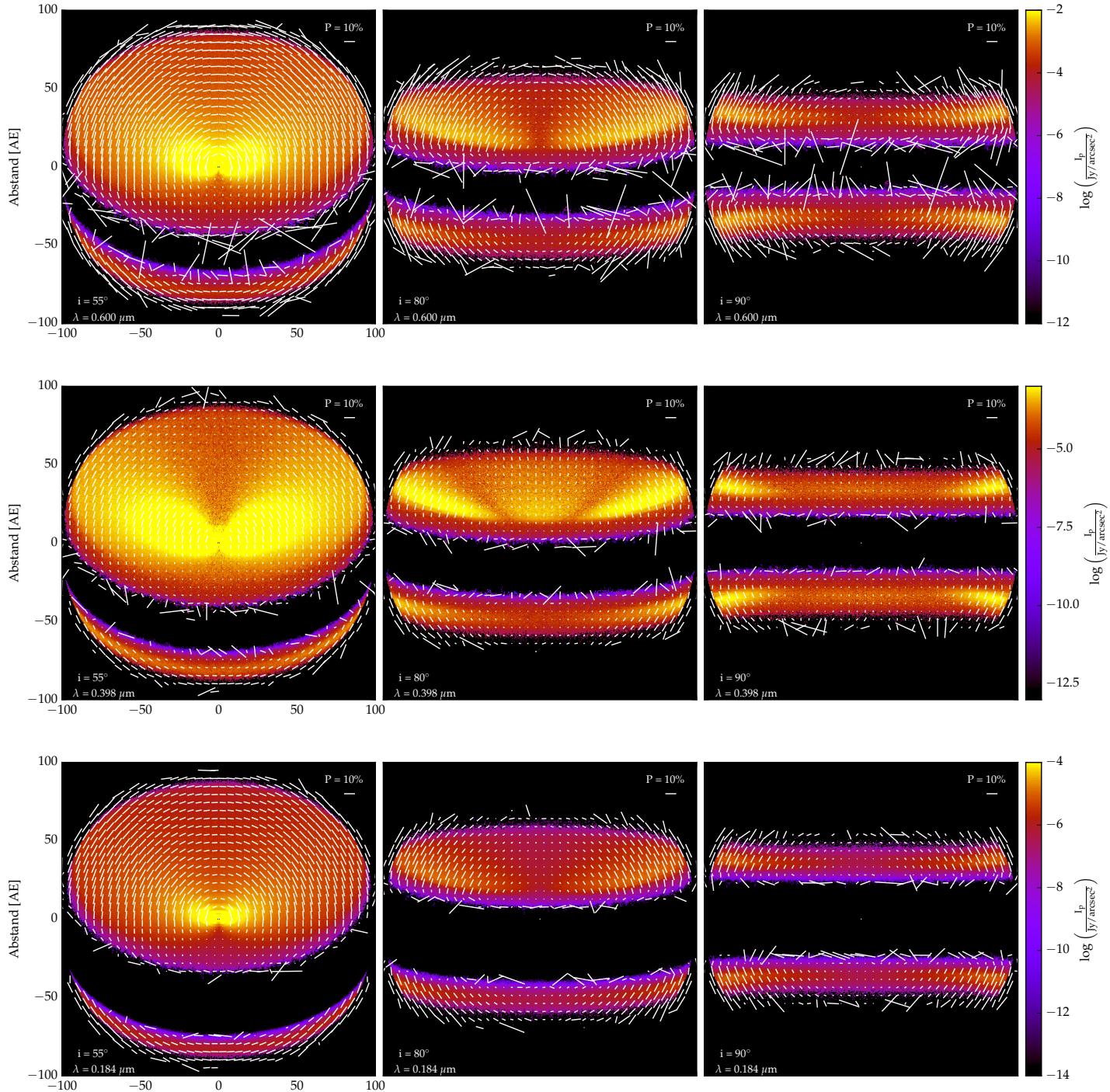


Abbildung A.5 – Vergleich der Ergebnisse der linearen Streupolarisation mit [Kirchschlager und Wolf \[2014\]](#) mit verwendeter *Peel-off*-Technik.

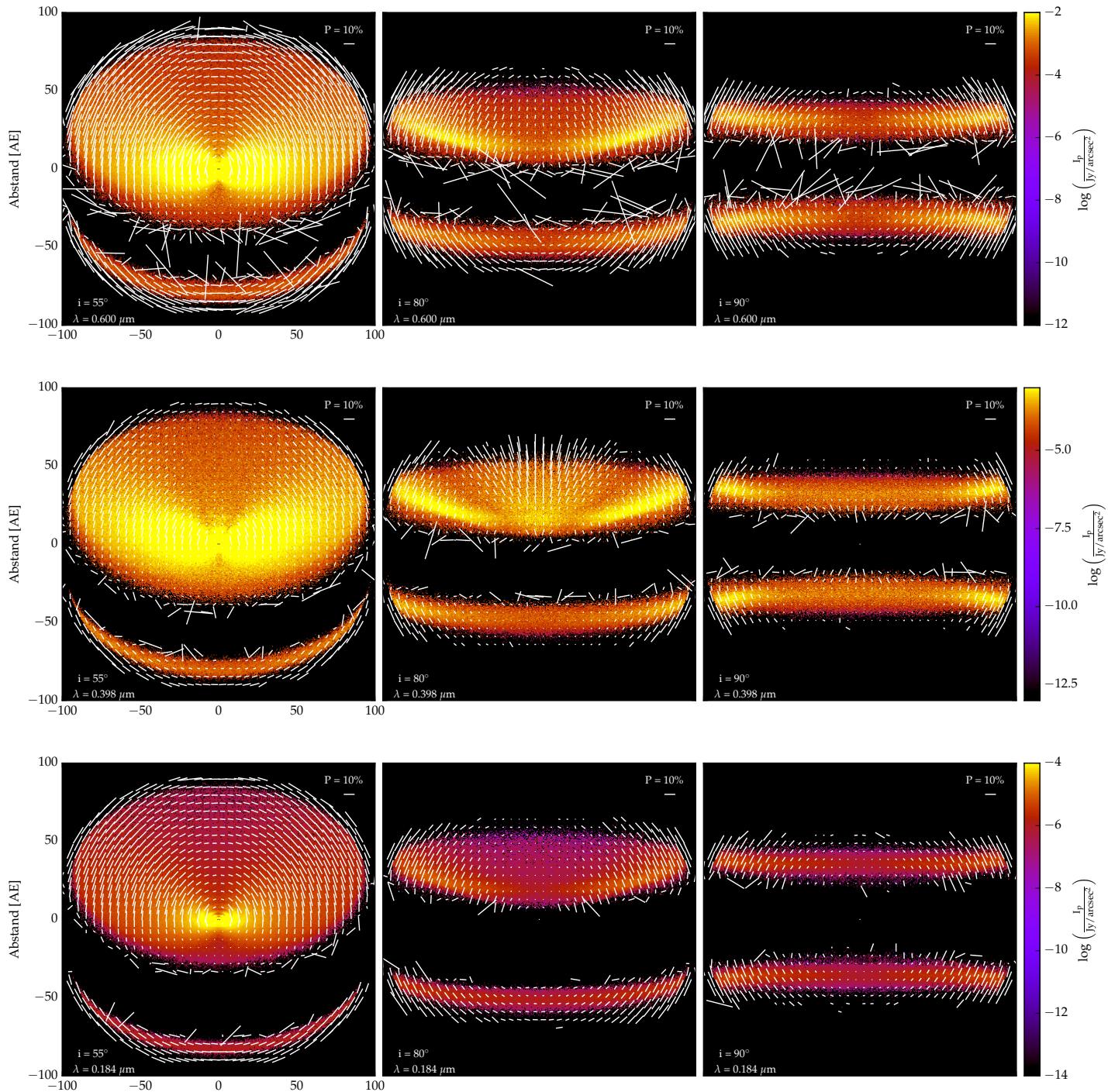


Abbildung A.6 – Vergleich der Ergebnisse der linearen Streupolarisation mit Kirchschlager und Wolf [2014] ohne Peel-off-Technik.

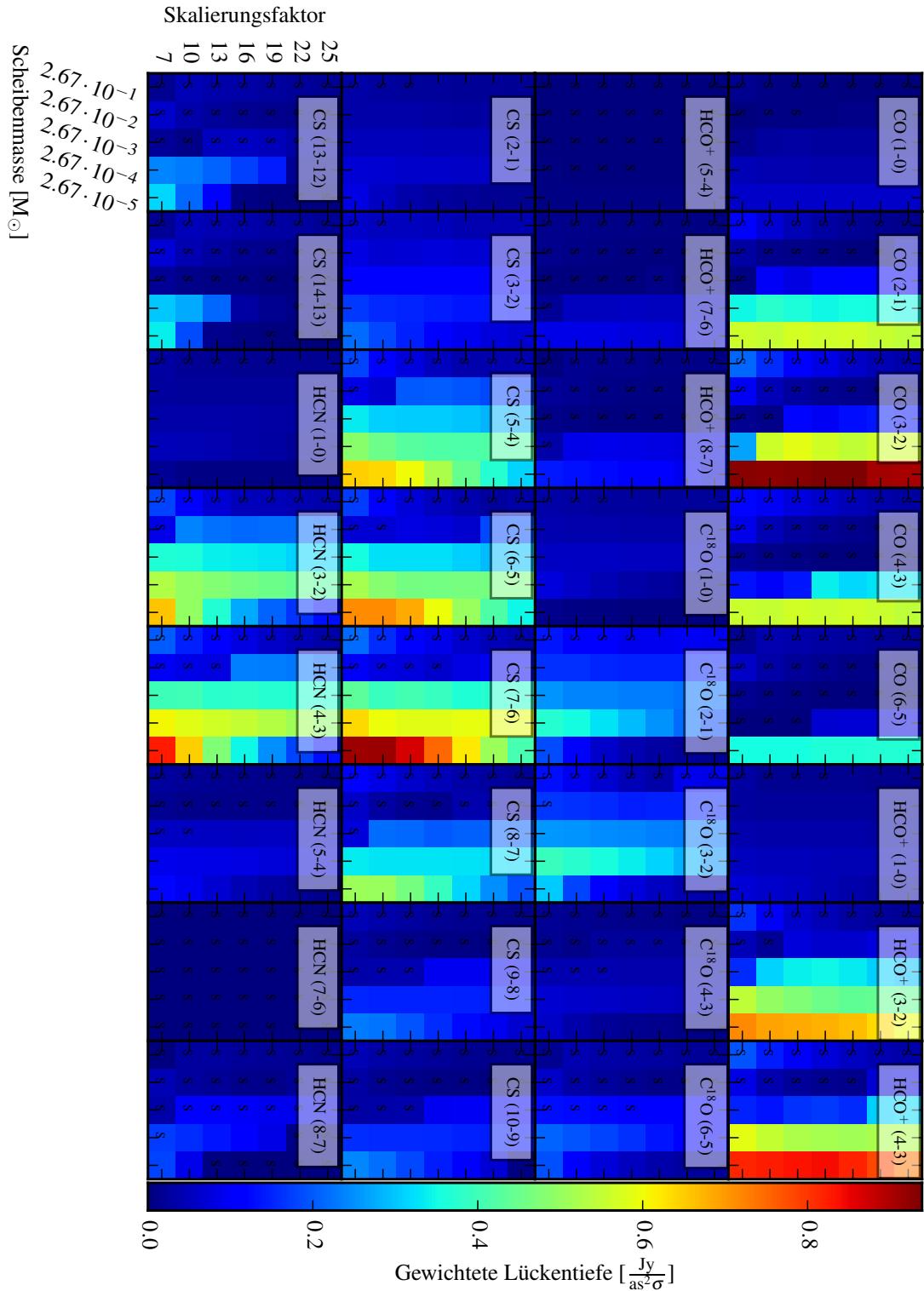


Abbildung A.7 – Übersichtskarte der in den idealen Geschwindigkeitskarten abgeleiteten Lückentiefe für die fünf betrachteten Moleküle und insgesamt 32 Linienübergänge. Die zentrale Strahlungsquelle ist ein T Tauri-Stern.

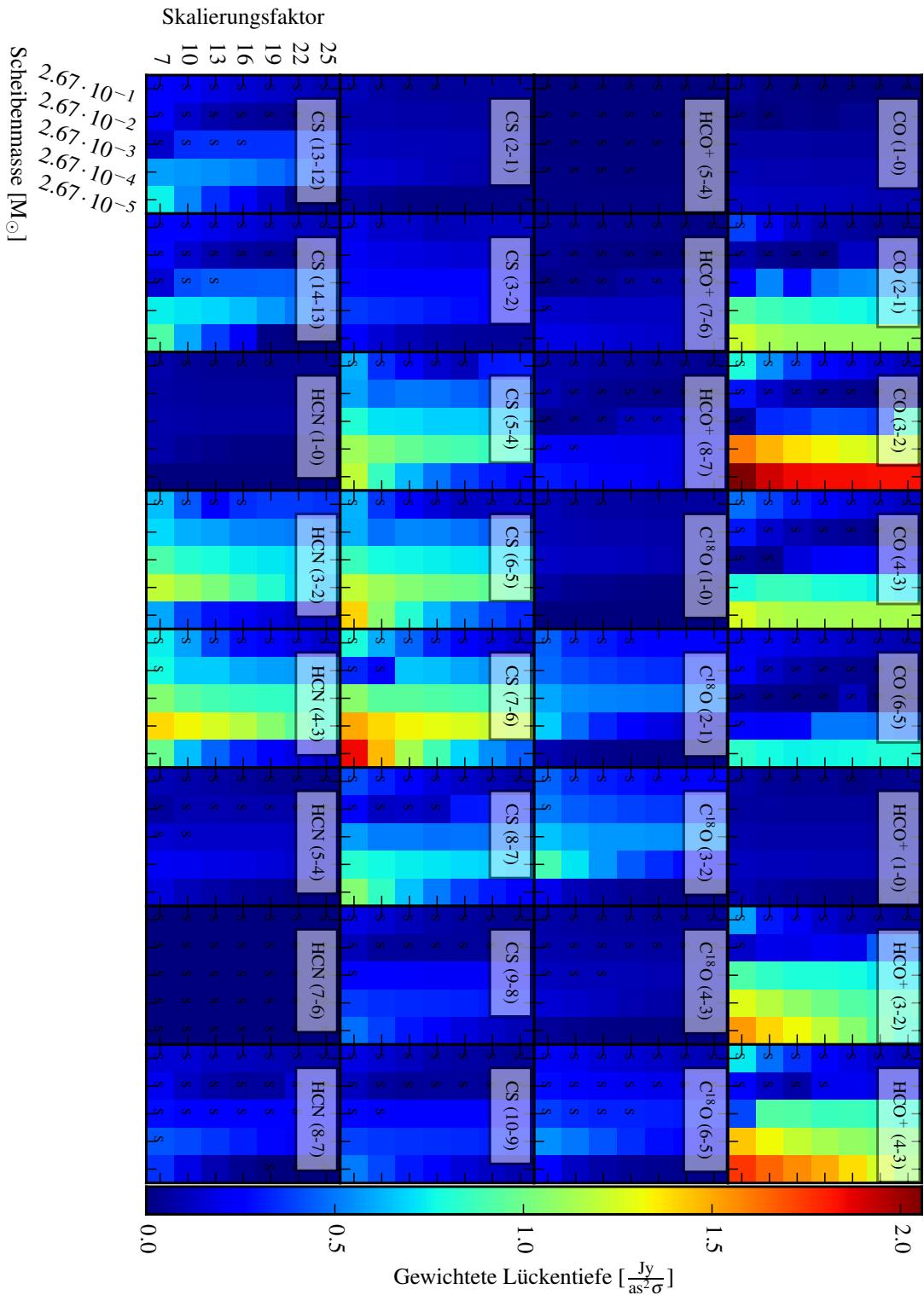


Abbildung A.8 – Übersichtskarte der in den idealen Geschwindigkeitskarten abgeleiteten Lückentiefe für die fünf betrachteten Moleküle und insgesamt 32 Linienübergänge. Die zentrale Strahlungsquelle ist ein Herbig Ae-Stern.

B

NATURKONSTANTEN

Astronomische Konstanten	Formelzeichen	Wert (gerundet)
Astronomische Einheit	AE	$1.496 \cdot 10^{11} \text{ m}$
Parallaxensekunde (Parsec)	pc	$3.086 \cdot 10^{16} \text{ m}$
Sonnenmasse	M_{\odot}	$1.989 \cdot 10^{30} \text{ kg}$
Jupitermasse	M_J	$1.899 \cdot 10^{27} \text{ kg}$
Sonnenradius	R_{\odot}	$6.960 \cdot 10^8 \text{ m}$
Sonnenleuchtkraft	L_{\odot}	$3.846 \cdot 10^{26} \text{ W}$
Effektivtemperatur der Sonne	$T_{\text{eff},\odot}$	5780 K

Physikalische Fundamentalkonstanten	Formelzeichen	Wert (gerundet)
Gravitationskonstante	G	$6.6726 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg s}^{-2}$
Lichtgeschwindigkeit im Vakuum	c	$2.9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Planck-Konstante	h	$6.6261 \cdot 10^{-34} \text{ m}^3 \text{ kg s}^{-1}$
Boltzman-Konstante	k_B	$1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

Tabelle B.1 – Auflistung der in dieser Arbeit verwendeten physikalischen Konstanten nach [Unsöld und Baschek \[2002\]](#).

LITERATURVERZEICHNIS

Fred C. Adams, Charles J. Lada, und Frank H. Shu. Spectral evolution of young stellar objects. *The Astrophysical Journal*, 312:788–806, January 1987. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/164924](https://doi.org/10.1086/164924). (Zitiert auf Seite [5](#).)

Y. Aikawa und H. Nomura. Physical and Chemical Structure of Protoplanetary Disks with Grain Growth. *The Astrophysical Journal*, 642:1152–1162, May 2006. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/501114](https://doi.org/10.1086/501114). (Zitiert auf den Seiten [18](#) und [79](#).)

ALMA Partnership. First Results from High Angular Resolution ALMA Observations Toward the HL Tau Region. *arXiv:1503.02649 [astro-ph]*, March 2015. (Zitiert auf den Seiten [1](#), [5](#), [9](#), [12](#), [105](#) und [163](#).)

Sean M. Andrews und Jonathan P. Williams. Circumstellar Dust Disks in Taurus-Auriga: The Submillimeter Perspective. *The Astrophysical Journal*, 631:1134–1160, October 2005. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/432712](https://doi.org/10.1086/432712). (Zitiert auf Seite [6](#).)

Sean M. Andrews, D. J. Wilner, A. M. Hughes, Chunhua Qi, und C. P. Dullemond. Protoplanetary Disk Structures in Ophiuchus. II. Extension to Fainter Sources. *The Astrophysical Journal*, 723:1241–1254, November 2010. ISSN 0004-637X. doi: [10.1088/0004-637X/723/2/1241](https://doi.org/10.1088/0004-637X/723/2/1241). (Zitiert auf Seite [78](#).)

Sean M. Andrews, David J. Wilner, Catherine Espaillat, A. M. Hughes, C. P. Dullemond, M. K. McClure, Chunhua Qi, und J. M. Brown. Resolved Images of Large Cavities in Protoplanetary Transition Disks. *The Astrophysical Journal*, 732:42, May 2011. ISSN 0004-637X. doi: [10.1088/0004-637X/732/1/42](https://doi.org/10.1088/0004-637X/732/1/42). (Zitiert auf Seite [78](#).)

Philip J. Armitage. *Astrophysics of Planet Formation*. 2010. (Zitiert auf Seite [7](#).)

H. H. Aumann, C. A. Beichman, F. C. Gillett, T. de Jong, J. R. Houck, F. J. Low, G. Neugebauer, R. G. Walker, und P. R. Wesselius. Discovery of a shell around Alpha Lyrae. *The Astrophysical Journal Letters*, 278:L23–L27, March 1984. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/184214](https://doi.org/10.1086/184214). (Zitiert auf Seite [7](#).)

Dana E. Backman und Francesco Paresce. Main-sequence stars with circumstellar solid material - The VEGA phenomenon. pages 1253–1304, 1993. (Zitiert auf Seite [48](#).)

Steven A. Balbus und John F. Hawley. A powerful local shear instability in weakly magnetized disks. I - Linear analysis. II - Nonlinear evolution. *The Astrophysical Journal*, 376:214–233, July 1991. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/170270](https://doi.org/10.1086/170270). (Zitiert auf den Seiten [6](#) und [106](#).)

- Steven A. Balbus und John F. Hawley. Instability, turbulence, and enhanced transport in accretion disks. *Reviews of Modern Physics*, 70:1–53, January 1998. ISSN 0034-6861. doi: 10.1103/RevModPhys.70.1. (Zitiert auf den Seiten [6](#) und [12](#).)
- Jacques M. Beckers. Adaptive Optics for Astronomy: Principles, Performance, and Applications. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 31(1):13–62, 1993. doi: 10.1146/annurev.aa.31.090193.000305. (Zitiert auf Seite [8](#).)
- G. Bertrang, S. Wolf, und H. S. Das. Large-scale magnetic fields in Bok globules. *Astronomy and Astrophysics*, 565:94, May 2014. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201323091. (Zitiert auf Seite [28](#).)
- J. E. Bjorkman und Kenneth Wood. Radiative equilibrium and temperature correction in Monte Carlo radiation transfer. *The Astrophysical Journal*, 554(1):615, 2001. (Zitiert auf den Seiten [27](#), [32](#), [37](#), [50](#), [53](#) und [134](#).)
- Jürgen Blum und Gerhard Wurm. Experiments on Sticking, Restructuring, and Fragmentation of Preplanetary Dust Aggregates. *Icarus*, 143:138–146, January 2000. ISSN 0019-1035. doi: 10.1006/icar.1999.6234. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- Craig F. Bohren und Donald R. Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. Wiley, 1983. ISBN 978-0-471-29340-8. (Zitiert auf den Seiten [22](#) und [35](#).)
- Max Born und Emil Wolf. *Principles of Optics*. October 1999. (Zitiert auf Seite [8](#).)
- F. Brauer, C. P. Dullemond, und Th. Henning. Coagulation, fragmentation and radial motion of solid particles in protoplanetary disks. *Astronomy and Astrophysics*, 480: 859–877, March 2008. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20077759. (Zitiert auf Seite [7](#).)
- R. Brauer und S. Wolf. Impact of an inhomogeneous density distribution on selected observational characteristics of circumstellar disks. *Astronomy & Astrophysics*, October 2015. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201526467. (Zitiert auf Seite [27](#).)
- César Briceño, K. L. Luhman, Lee Hartmann, John R. Stauffer, und J. Davy Kirkpatrick. The Initial Mass Function in the Taurus Star-forming Region. *The Astrophysical Journal*, 580:317–335, November 2002. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/343127. (Zitiert auf Seite [9](#).)
- Simon Bruderer, Nienke van der Marel, Ewine F. van Dishoeck, und Tim A. van Kempen. Gas structure inside dust cavities of transition disks: Ophiuchus IRS 48 observed by ALMA. *Astronomy and Astrophysics*, 562:26, February 2014. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201322857. (Zitiert auf den Seiten [40](#) und [73](#).)
- R. Brunngräber, S. Wolf, Th. Ratzka, und F. Ober. DR Tauri: Temporal variability of the brightness distribution in the potential planet-forming region. *Astronomy & Astrophysics*, November 2015. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201526691. (Zitiert auf Seite [44](#).)

G. Bryden, Xingming Chen, D. N. C. Lin, Richard P. Nelson, und John C. B. Papaloizou. Tidally Induced Gap Formation in Protostellar Disks: Gap Clearing and Suppression of Protoplanetary Growth. *The Astrophysical Journal*, 514:344–367, March 1999. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/306917. (Zitiert auf Seite 12.)

Joseph A. Burns, Philippe L. Lamy, und Steven Soter. Radiation forces on small particles in the solar system. *Icarus*, 40(1):1–48, October 1979. ISSN 0019-1035. doi: 10.1016/0019-1035(79)90050-2. (Zitiert auf Seite 6.)

A. G. W. Cameron. The formation of the sun and planets. *Icarus*, 1:13–69, 1962. ISSN 0019-1035. doi: 10.1016/0019-1035(62)90005-2. (Zitiert auf Seite 5.)

S. Casassus, A. Hales, I. de Gregorio, B. Dent, A. Belloche, R. Güsten, F. Ménard, A. M. Hughes, D. Wilner, und V. Salinas. CO(6-5) and [C i](2-1) pointed observations of five protoplanetary disks: Warm gas in HD 142527. *Astronomy and Astrophysics*, 553:A64, May 2013a. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201219644. (Zitiert auf Seite 40.)

Simon Casassus, Gerrit van der Plas, Sebastian Perez M, William R. F. Dent, Ed Formalont, Janis Hagelberg, Antonio Hales, Andrés Jordán, Dimitri Mawet, Francois Ménard, Al Wootten, David Wilner, A. Meredith Hughes, Matthias R. Schreiber, Julien H. Girard, Barbara Ercolano, Hector Canovas, Pablo E. Román, und Vachail Salinas. Flows of gas through a protoplanetary gap. *Nature*, 493(7431):191–194, January 2013b. ISSN 0028-0836. doi: 10.1038/nature11769. (Zitiert auf Seite 72.)

A. Castro-Carrizo, G. Quintana-Lacaci, V. Bujarrabal, R. Neri, und J. Alcolea. Arcsecond-resolution 12CO mapping of the yellow hypergiants IRC +10420 and AFGL 2343. *Astronomy and Astrophysics*, 465:457–467, April 2007. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20066169. (Zitiert auf Seite 19.)

E. Chapillon, S. Guilloteau, A. Dutrey, V. Piétu, und M. Guélin. Chemistry in disks. VI. CN and HCN in protoplanetary disks. *Astronomy and Astrophysics*, 537:A60, January 2012a. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201116762. (Zitiert auf den Seiten 72, 80 und 106.)

Edwige Chapillon, Anne Dutrey, Stéphane Guilloteau, Vincent Piétu, Valentine Wakelam, Franck Hersant, Frédéric Gueth, Thomas Henning, Ralf Launhardt, Katharina Schreyer, und Dmitry Semenov. Chemistry in Disks. VII. First Detection of HC₃N in Protoplanetary Disks. *The Astrophysical Journal*, 756:58, September 2012b. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/756/1/58. (Zitiert auf Seite 111.)

J. E. Chiar und A. G. G. M. Tielens. Pixie Dust: The Silicate Features in the Diffuse Interstellar Medium. *The Astrophysical Journal*, 637:774–785, February 2006. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/498406. (Zitiert auf Seite 21.)

L. Ilsedore Cleeves, Edwin A. Bergin, Thomas J. Bethell, Nuria Calvet, Jeffrey K. J. Fogel, Jürgen Sauter, und Sebastian Wolf. Transition Disk Chemistry and Future

- Prospects with ALMA. *The Astrophysical Journal Letters*, 743:L2, December 2011. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/2041-8205/743/1/L2. (Zitiert auf den Seiten [72](#), [74](#) und [79](#).)
- L. Ilsedore Cleeves, Edwin A. Bergin, Chunhua Qi, Fred C. Adams, und Karin I. Öberg. Constraining the X-Ray and Cosmic-Ray Ionization Chemistry of the TW Hya Protoplanetary Disk: Evidence for a Sub-interstellar Cosmic-Ray Rate. *The Astrophysical Journal*, 799:204, February 2015. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/799/2/204. (Zitiert auf Seite [106](#).)
- Jeffrey N. Cuzzi, Robert C. Hogan, und Karim Shariff. Toward Planetesimals: Dense Chondrule Clumps in the Protoplanetary Nebula. *The Astrophysical Journal*, 687:1432–1447, November 2008. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/591239. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- Paola D'Alessio, Lee Hartmann, Nuria Calvet, Ramiro Franco-Hernández, William J. Forrest, Ben Sargent, Elise Furlan, Keven Uchida, Joel D. Green, Dan M. Watson, Christine H. Chen, F. Kemper, G. C. Sloan, und Joan Najita. The Truncated Disk of CoKu Tau/4. *The Astrophysical Journal*, 621(1):461, March 2005. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/427490. (Zitiert auf Seite [80](#).)
- Gennaro D'Angelo, Thomas Henning, und Willy Kley. Thermohydrodynamics of Circumstellar Disks with High-Mass Planets. *The Astrophysical Journal*, 599:548–576, December 2003. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/379224. (Zitiert auf Seite [12](#).)
- E. Dartois, A. Dutrey, und S. Guilloteau. Structure of the DM Tau Outer Disk: Probing the vertical kinetic temperature gradient. *Astronomy and Astrophysics*, 399:773–787, February 2003. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20021638. (Zitiert auf den Seiten [18](#) und [79](#).)
- I. de Gregorio-Monsalvo, F. Ménard, W. Dent, C. Pinte, C. López, P. Klaassen, A. Hales, P. Cortés, M. G. Rawlings, K. Tachihara, L. Testi, S. Takahashi, E. Chapillon, G. Mathews, A. Juhasz, E. Akiyama, A. E. Higuchi, M. Saito, L.-Å. Nyman, N. Phillips, J. Rodón, S. Corder, und T. Van Kempen. Unveiling the gas-and-dust disk structure in HD 163296 using ALMA observations. *Astronomy and Astrophysics*, 557:133, September 2013. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201321603. (Zitiert auf den Seiten [9](#) und [72](#).)
- T. de Jong, A. Dalgarno, und S.-I. Chu. Carbon monoxide in collapsing interstellar clouds. *The Astrophysical Journal*, 199:69–78, July 1975. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/153665. (Zitiert auf Seite [20](#).)
- T. de Jong, W. Boland, und A. Dalgarno. Hydrostatic models of molecular clouds. *Astronomy and Astrophysics*, 91:68–84, November 1980. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite [20](#).)

- J. S. Dohnanyi. Collisional Model of Asteroids and Their Debris. *Journal of Geophysical Research*, 74:2531, May 1969. ISSN 0148-0227. doi: 10.1029/JB074i01o02531. (Zitiert auf den Seiten [6](#), [21](#) und [78](#).)
- B. T. Draine und Sangeeta Malhotra. On graphite and the 2175 Å extinction profile. *The Astrophysical Journal*, 414:632–645, September 1993. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/173109. (Zitiert auf Seite [21](#).)
- Bruce T. Draine und Piotr J. Flatau. Discrete-dipole approximation for scattering calculations. *Journal of the Optical Society of America A: Optics and Image Science (ISSN 0740-3232)*, vol. 11, no. 4, p. 1491–1499, 11:1491–1499, April 1994. ISSN 0740-3232. doi: 10.1364/JOSAA.11.001491. (Zitiert auf Seite [32](#).)
- Bruce T. Draine und Piotr J. Flatau. Discrete-dipole approximation for periodic targets: theory and tests. *Journal of the Optical Society of America A*, 25(11):2693, November 2008. ISSN 1084-7529, 1520-8532. doi: 10.1364/JOSAA.25.002693. (Zitiert auf Seite [32](#).)
- C. P. Dullemond und C. Dominik. Dust coagulation in protoplanetary disks: A rapid depletion of small grains. *Astronomy and Astrophysics*, 434:971–986, May 2005. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20042080. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- C. P. Dullemond und C. Dominik. Size-sorting dust grains in the surface layers of protoplanetary disks. *Astronomy and Astrophysics*, 487:205–209, August 2008. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:200809745. (Zitiert auf Seite [7](#).)
- R. H. Durisen, A. P. Boss, L. Mayer, A. F. Nelson, T. Quinn, und W. K. M. Rice. Gravitational Instabilities in Gaseous Protoplanetary Disks and Implications for Giant Planet Formation. *Protostars and Planets V*, pages 607–622, 2007. (Zitiert auf Seite [12](#).)
- A. Dutrey, S. Guilloteau, V. Piétu, E. Chapillon, F. Gueth, T. Henning, R. Launhardt, Y. Pavlyuchenkov, K. Schreyer, und D. Semenov. Cavities in inner disks: the GM Aurigae case. *Astronomy and Astrophysics*, 490:L15–L18, November 2008. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:200810732. (Zitiert auf Seite [72](#).)
- Natalia Dzyurkevich, Neal J. Turner, Thomas Henning, und Wilhelm Kley. Magnetized Accretion and Dead Zones in Protostellar Disks. *The Astrophysical Journal*, 765:114, March 2013. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/765/2/114. (Zitiert auf den Seiten [108](#), [110](#) und [167](#).)
- A. S. Eddington. Bakerian Lecture. Diffuse Matter in Interstellar Space. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 111(759):424–456, July 1926. ISSN 1364-5021, 1471-2946. doi: 10.1098/rspa.1926.0076. (Zitiert auf Seite [19](#).)

Gisela Engeln-Müllges, Klaus Niederdrenk, und Reinhard Wodicka. *Numerik-Algorithmen*. Xpert.press. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011. ISBN 978-3-642-13472-2 978-3-642-13473-9. (Zitiert auf Seite [46](#).)

Dr E. Fehlberg. Klassische runge-kutta-formeln vierter und niedrigerer ordnung mit schrittweiten-kontrolle und ihre anwendung auf wärmeleitungsprobleme. *Computing*, 6(1-2):61–71, March 1970. ISSN 0010-485X, 1436-5057. doi: [10.1007/BF02241732](https://doi.org/10.1007/BF02241732). (Zitiert auf Seite [46](#).)

O. Fischer. *Modellierung der Polarisation in zirkumstellaren Staubhüllen unter Anwendung der Monte-Carlo-Methode*. Dissertation, Friedrich Schiller Universität, Jena, 1992. (Zitiert auf den Seiten [27](#) und [35](#).)

O. Fischer, Th. Henning, und H. W. Yorke. Simulation of polarization maps. 1: Protostellar envelopes. *Astronomy and Astrophysics*, 284:187–209, April 1994. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite [57](#).)

M. Flock, J. P. Ruge, N. Dzyurkevich, Th. Henning, H. Klahr, und S. Wolf. Gaps, rings, and non-axisymmetric structures in protoplanetary disks. From simulations to ALMA observations. *Astronomy and Astrophysics*, 574:A68, February 2015. ISSN 0004-6361. doi: [10.1051/0004-6361/201424693](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201424693). (Zitiert auf den Seiten [12](#), [27](#), [73](#), [106](#), [107](#), [109](#), [111](#) und [121](#).)

Duncan Forgan, Philip J. Armitage, und Jacob B. Simon. Turbulent linewidths as a diagnostic of self-gravity in protostellar discs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 426:2419–2426, November 2012. ISSN 0035-8711. doi: [10.1111/j.1365-2966.2012.21962.x](https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2012.21962.x). (Zitiert auf Seite [113](#).)

W. J. Forrest, B. Sargent, E. Furlan, P. D'Alessio, N. Calvet, L. Hartmann, K. I. Uchida, J. D. Green, D. M. Watson, C. H. Chen, F. Kemper, L. D. Keller, G. C. Sloan, T. L. Herter, B. R. Brandl, J. R. Houck, D. J. Barry, P. Hall, P. W. Morris, J. Najita, und P. C. Myers. Mid-infrared Spectroscopy of Disks around Classical T Tauri Stars. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 154(1):443, September 2004. ISSN 0067-0049. doi: [10.1086/423138](https://doi.org/10.1086/423138). (Zitiert auf Seite [80](#).)

P. Goldreich und S. Tremaine. Disk-satellite interactions. *The Astrophysical Journal*, 241:425–441, October 1980. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/158356](https://doi.org/10.1086/158356). (Zitiert auf den Seiten [7](#), [12](#) und [71](#).)

Peter Goldreich und William R. Ward. The Formation of Planetesimals. *The Astrophysical Journal*, 183:1051–1062, August 1973. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/152291](https://doi.org/10.1086/152291). (Zitiert auf Seite [6](#).)

J.-F. Gonzalez, C. Pinte, S. T. Maddison, F. Ménard, und L. Fouchet. Planet gaps in the dust layer of 3D protoplanetary disks. II. Observability with ALMA. *Astronomy and Astrophysics*, 547:A58, November 2012. ISSN 0004-6361. doi: [10.1051/0004-6361/201218806](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201218806). (Zitiert auf den Seiten [12](#) und [103](#).)

Joseph W. Goodman. *Introduction to Fourier optics*. 2005. ISBN 0-7506-6756-7. (Zitiert auf Seite 8.)

M. Goto, G. van der Plas, M. van den Ancker, C. P. Dullemond, A. Carmona, Th. Henning, G. Meeus, H. Linz, und B. Stecklum. Warm gas at 50 AU in the disk around Herbig Be star HD 100546. *Astronomy and Astrophysics*, 539:81, March 2012. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201117528. (Zitiert auf Seite 79.)

C. Gräfe, S. Wolf, S. Guilloteau, A. Dutrey, K. R. Stapelfeldt, K. M. Pontoppidan, und J. Sauter. Vertical settling and radial segregation of large dust grains in the circumstellar disk of the Butterfly Star. *Astronomy & Astrophysics*, 553:A69, May 2013. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201220720. (Zitiert auf den Seiten 10, 21 und 95.)

Christian Gräfe und Sebastian Wolf. Mid-infrared observations of the circumstellar disks around PDS 66 and CRBR 2422.8-3423. *Astronomy & Astrophysics*, 552:A88, 2013. doi: 10.1051/0004-6361/201321148. (Zitiert auf den Seiten 10, 27 und 108.)

S. Guilloteau, A. Dutrey, J. Pety, und F. Gueth. Resolving the circumbinary dust disk surrounding HH 30. *Astronomy and Astrophysics*, 478:L31–L34, February 2008. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20079053. (Zitiert auf Seite 108.)

S. Guilloteau, A. Dutrey, V. Wakelam, F. Hersant, D. Semenov, E. Chapillon, T. Henning, und V. Piétu. Chemistry in disks. VIII. The CS molecule as an analytic tracer of turbulence in disks. *Astronomy and Astrophysics*, 548:A70, December 2012. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201220331. (Zitiert auf Seite 106.)

Karl E. Haisch, Jr., Elizabeth A. Lada, und Charles J. Lada. Disk Frequencies and Lifetimes in Young Clusters. *The Astrophysical Journal Letters*, 553:L153–L156, June 2001. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/320685. (Zitiert auf Seite 6.)

Chris Haniff. An introduction to the theory of interferometry. *New Astronomy Reviews*, 51(8–9):565–575, October 2007. ISSN 1387-6473. doi: 10.1016/j.newar.2007.06.002. (Zitiert auf Seite 8.)

Lee Hartmann, Nuria Calvet, Erik Gullbring, und Paola D'Alessio. Accretion and the Evolution of T Tauri Disks. *The Astrophysical Journal*, 495:385–400, March 1998. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/305277. (Zitiert auf Seite 6.)

F. Hersant, V. Wakelam, A. Dutrey, S. Guilloteau, und E. Herbst. Cold CO in circumstellar disks. On the effects of photodesorption and vertical mixing. *Astronomy and Astrophysics*, 493:L49–L52, January 2009. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:200811082. (Zitiert auf Seite 79.)

R. H. Hildebrand. The Determination of Cloud Masses and Dust Characteristics from Submillimetre Thermal Emission. *Quarterly Journal of the Royal Astronomical Society*, 24:267, September 1983. ISSN 0035-8738. (Zitiert auf Seite 6.)

- G. W. Hill. Researches in the Lunar Theory. *American Journal of Mathematics*, 1(1): 5–26, 1878. ISSN 0002-9327. doi: 10.2307/2369430. (Zitiert auf Seite [76](#).)
- J. A. Högbom. Aperture Synthesis with a Non-Regular Distribution of Interferometer Baselines. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 15:417, June 1974. ISSN 0365-0138. (Zitiert auf Seite [11](#).)
- M. R. Hogerheijde und F. F. S. van der Tak. An accelerated Monte Carlo method to solve two-dimensional radiative transfer and molecular excitation. With applications to axisymmetric models of star formation. *Astronomy and Astrophysics*, 362: 697–710, October 2000. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite [28](#).)
- David Hollenbach, Doug Johnstone, Susana Lizano, und Frank Shu. Photoevaporation of disks around massive stars and application to ultracompact H II regions. *The Astrophysical Journal*, 428:654–669, June 1994. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/174276. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- A. Meredith Hughes, David J. Wilner, Sean M. Andrews, Chunhua Qi, und Michiel R. Hogerheijde. Empirical Constraints on Turbulence in Protoplanetary Accretion Disks. *The Astrophysical Journal*, 727:85, February 2011. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/727/2/85. (Zitiert auf den Seiten [39](#) und [110](#).)
- Hannah Jang-Condell und Neal J. Turner. Gaps in Protoplanetary Disks as Signatures of Planets. I. Methodology and Validation. *The Astrophysical Journal*, 749:153, April 2012. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/749/2/153. (Zitiert auf Seite [103](#).)
- A. Johansen, H. Klahr, und Th. Henning. Gravoturbulent Formation of Planetesimals. *The Astrophysical Journal*, 636:1121–1134, January 2006a. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/498078. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- Anders Johansen, Thomas Henning, und Hubert Klahr. Dust Sedimentation and Self-sustained Kelvin-Helmholtz Turbulence in Protoplanetary Disk Midplanes. *The Astrophysical Journal*, 643:1219–1232, June 2006b. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/502968. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- Hannu Karttunen, Pekka Kröger, Heikki Oja, Markku Poutanen, und Karl Johan Donner. *Fundamental Astronomy*. Springer, Berlin ; New York, 5th ed. 2007 edition, June 2007. ISBN 978-3-540-34143-7. (Zitiert auf den Seiten [7](#) und [13](#).)
- J. H. Kastner, B. Zuckerman, D. A. Weintraub, und T. Forveille. X-ray and molecular emission from the nearest region of recent star formation. *Science*, 277:67–71, 1997. ISSN 0036-8075. doi: 10.1126/science.277.5322.67. (Zitiert auf den Seiten [72](#) und [107](#).)
- Akimasa Kataoka, Takayuki Muto, Munetake Momose, Takashi Tsukagoshi, Misato Fukagawa, Hiroshi Shibai, Tomoyuki Hanawa, Koji Murakawa, und Cornelis P. Dullemond. Millimeter-wave Polarization of Protoplanetary Disks due to Dust

Scattering. *The Astrophysical Journal*, 809:78, August 2015. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/809/1/78. (Zitiert auf Seite [57](#).)

G. M. Kennedy, S. J. Murphy, C. M. Lisse, F. Ménard, M. L. Sitko, M. C. Wyatt, D. D. R. Bayliss, F. E. DeMeo, K. B. Crawford, D. L. Kim, R. J. Rudy, R. W. Russell, B. Sibthorpe, M. A. Skinner, und G. Zhou. Evolution from protoplanetary to debris discs: the transition disc around HD 166191. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 438:3299–3309, March 2014. ISSN 0035-8711. doi: 10.1093/mnras/stt2435. (Zitiert auf Seite [80](#).)

F. Kirchschlager und S. Wolf. Effect of dust grain porosity on the appearance of protoplanetary disks. *Astronomy and Astrophysics*, 568:A103, August 2014. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201323176. (Zitiert auf den Seiten [6](#), [10](#), [21](#), [27](#), [51](#), [54](#), [55](#), [57](#), [59](#), [138](#), [139](#) und [169](#).)

H. Klahr und W. Kley. 3D-radiation hydro simulations of disk-planet interactions: I. Numerical algorithm and test cases. *Astronomy and Astrophysics*, 445(2):747–758, January 2006. ISSN 0004-6361, 1432-0756. doi: 10.1051/0004-6361:20053238. (Zitiert auf Seite [12](#).)

W. Kley. Mass flow and accretion through gaps in accretion discs. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 303:696–710, March 1999. ISSN 0035-8711. doi: 10.1046/j.1365-8711.1999.02198.x;. (Zitiert auf Seite [12](#).)

L'Ecuyer. Good Parameters and Implementations for Combined Multiple Recursive Random Number Generators. *Operations Research*, 47(1):159–164, 1999a. ISSN 0030-364X. doi: 10.1287/opre.47.1.159. (Zitiert auf Seite [24](#).)

Pierre L'Ecuyer. Maximally equidistributed combined Tausworthe generators. *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society*, 65(213):203–213, 1996a. ISSN 0025-5718, 1088-6842. doi: 10.1090/S0025-5718-96-00696-5. (Zitiert auf Seite [24](#).)

Pierre L'Ecuyer. Combined Multiple Recursive Random Number Generators. *Operations Research*, 44(5):816–822, September 1996b. ISSN 0030-364X. (Zitiert auf Seite [24](#).)

Pierre L'Ecuyer. Tables of Maximally Equidistributed Combined LFSR Generators. *Math. Comput.*, 68(225):261–269, January 1999b. ISSN 0025-5718. doi: 10.1090/S0025-5718-99-01039-X. (Zitiert auf Seite [24](#).)

Pierre L'Ecuyer und Richard Simard. TestU01: A C Library for Empirical Testing of Random Number Generators. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4), August 2007. ISSN 0098-3500. doi: 10.1145/1268776.1268777. (Zitiert auf den Seiten [24](#), [25](#) und [135](#).)

L. B. Lucy. Computing radiative equilibria with Monte Carlo techniques. *Astronomy and Astrophysics*, 344:282–288, April 1999a. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf den Seiten [32](#), [34](#) und [37](#).)

- L. B. Lucy. Improved Monte Carlo techniques for the spectral synthesis of supernovae. *Astronomy and Astrophysics*, 345:211–220, May 1999b. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf den Seiten [27](#) und [134](#).)
- K. Lumme und J. Rahola. Light scattering by porous dust particles in the discrete-dipole approximation. *The Astrophysical Journal*, 425:653–667, April 1994. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/174012](https://doi.org/10.1086/174012). (Zitiert auf Seite [21](#).)
- D. Madlener, S. Wolf, A. Dutrey, und S. Guilloteau. The circumstellar disk of HH 30: Searching for signs of disk evolution with multi-wavelength modeling. *Astronomy & Astrophysics*, 543:A81, July 2012. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: [10.1051/0004-6361/201117615](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201117615). (Zitiert auf den Seiten [10](#), [21](#), [27](#) und [108](#).)
- David Madlener. *Multi-spektrale Modellierungen von jungen stellaren Objekten mit Monte-Carlo-Methoden*. Dissertation, Christian Albrecht Universität zu Kiel, 2013. (Zitiert auf Seite [23](#).)
- Peter G. Martin. *Cosmic dust. Its impact on astronomy*. 1978. (Zitiert auf Seite [22](#).)
- J. S. Mathis, W. Rumpl, und K. H. Nordsieck. The size distribution of interstellar grains. *The Astrophysical Journal*, 217:425–433, October 1977. ISSN 0004-637X. doi: [10.1086/155591](https://doi.org/10.1086/155591). (Zitiert auf den Seiten [6](#), [21](#) und [78](#).)
- J. S. Mathis, P. G. Mezger, und N. Panagia. Interstellar radiation field and dust temperatures in the diffuse interstellar matter and in giant molecular clouds. *Astronomy and Astrophysics*, 128:212–229, November 1983. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite [19](#).)
- Makoto Matsumoto und Takuji Nishimura. Mersenne Twister: A 623-dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-random Number Generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8(1):3–30, January 1998. ISSN 1049-3301. doi: [10.1145/272991.272995](https://doi.org/10.1145/272991.272995). (Zitiert auf Seite [24](#).)
- Brenda C. Matthews, Alexander V. Krivov, Mark C. Wyatt, Geoff Bryden, und Carlos Eiroa. Observations, Modeling and Theory of Debris Disks. *arXiv:1401.0743 [astroph]*, 2014. doi: [10.2458/azu_uapress_9780816531240-cho23](https://doi.org/10.2458/azu_uapress_9780816531240-cho23). (Zitiert auf Seite [7](#).)
- Christopher F. McKee und Eve C. Ostriker. Theory of Star Formation. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 45(1):565–687, 2007. doi: [10.1146/annurev.astro.45.051806.110602](https://doi.org/10.1146/annurev.astro.45.051806.110602). (Zitiert auf Seite [5](#).)
- J. P. McMullin, B. Waters, D. Schiebel, W. Young, und K. Golap. CASA Architecture and Applications. volume 376, page 127, October 2007. ISBN 1050-3390. (Zitiert auf Seite [11](#).)
- Gustav Mie. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen. *Annalen der Physik*, 330(3):377–445, January 1908. ISSN 1521-3889. doi: [10.1002/andp.19083300302](https://doi.org/10.1002/andp.19083300302). (Zitiert auf Seite [22](#).)

- A. Mignone, G. Bodo, S. Massaglia, T. Matsakos, O. Tesileanu, C. Zanni, und A. Ferrari. PLUTO: A Numerical Code for Computational Astrophysics. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 170:228–242, May 2007. ISSN 0067-0049. doi: 10.1086/513316. (Zitiert auf den Seiten [73](#) und [74](#).)
- D. Mihalas, L. H. Auer, und B. R. Mihalas. Two-dimensional radiative transfer. I - Planar geometry. *The Astrophysical Journal*, 220:1001–1023, March 1978. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/155988. (Zitiert auf Seite [20](#).)
- T. J. Millar, P. R. A. Farquhar, und K. Willacy. The UMIST Database for Astrochemistry 1995. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 121:139–185, January 1997. ISSN 0365-0138. doi: 10.1051/aas:1997118. (Zitiert auf Seite [79](#).)
- M. Min, C. P. Dullemond, C. Dominik, A. de Koter, und J. W. Hovenier. Radiative transfer in very optically thick circumstellar disks. *Astronomy and Astrophysics*, 497: 155–166, April 2009. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/200811470. (Zitiert auf Seite [37](#).)
- Christoph Mordasini, Hubert Klahr, Yann Alibert, Willy Benz, und Kai-Martin Dittkrist. Theory of planet formation. *proceedings workshop "Circumstellar disks and planets: Science cases for the second generation VLTI instrumentation"*, December 2010. (Zitiert auf Seite [71](#).)
- F. Ober, S. Wolf, A. L. Uribe, und H. H. Klahr. Tracing planet-induced structures in circumstellar disks using molecular lines. *Astronomy & Astrophysics*, 579:A105, July 2015. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201526117. (Zitiert auf den Seiten [71](#) und [175](#).)
- Florian Ober. *Innere Strukturen zirkumstellarer Scheiben*. Diplomarbeit, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2011. (Zitiert auf Seite [23](#).)
- Karin I. Öberg, Chunhua Qi, Jeffrey K. J. Fogel, Edwin A. Bergin, Sean M. Andrews, Catherine Espaillat, Tim A. van Kempen, David J. Wilner, und Ilaria Pascucci. The Disk Imaging Survey of Chemistry with SMA. I. Taurus Protoplanetary Disk Data. *The Astrophysical Journal*, 720:480–493, September 2010. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/720/1/480. (Zitiert auf den Seiten [72](#) und [107](#).)
- Karin I. Öberg, Chunhua Qi, Jeffrey K. J. Fogel, Edwin A. Bergin, Sean M. Andrews, Catherine Espaillat, David J. Wilner, Ilaria Pascucci, und Joel H. Kastner. Disk Imaging Survey of Chemistry with SMA. II. Southern Sky Protoplanetary Disk Data and Full Sample Statistics. *The Astrophysical Journal*, 734:98, June 2011. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/734/2/98. (Zitiert auf Seite [120](#).)
- Donald E. Osterbrock und Gary J. Ferland. *Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei*. Palgrave Macmillan, 2006. (Zitiert auf Seite [20](#).)

- S.-J. Paardekooper und G. Mellem. Planets opening dust gaps in gas disks. *Astronomy and Astrophysics*, 425:L9–L12, October 2004. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:200400053. (Zitiert auf Seite [73](#).)
- O. Panić, M. R. Hogerheijde, D. Wilner, und C. Qi. A break in the gas and dust surface density of the disc around the T Tauri star IM Lupi. *Astronomy and Astrophysics*, 501:269–278, July 2009. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/200911883. (Zitiert auf Seite [110](#).)
- J. Papaloizou und D. N. C. Lin. On the tidal interaction between protoplanets and the primordial solar nebula. I - Linear calculation of the role of angular momentum exchange. *The Astrophysical Journal*, 285:818–834, October 1984. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/162561. (Zitiert auf Seite [12](#).)
- I. Pascucci, S. Wolf, J. Steinacker, C. P. Dullemond, Th. Henning, G. Niccolini, P. Woitke, und B. Lopez. The 2D continuum radiative transfer problem. Benchmark results for disk configurations. *Astronomy and Astrophysics*, 417:793–805, April 2004. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20040017. (Zitiert auf Seite [27](#).)
- Ya Pavlyuchenkov, D. Semenov, Th Henning, V. Piétu, R. Launhardt, und A. Dutrey. Molecular line radiative transfer in protoplanetary disks: Monte Carlo simulations versus approximate methods. *The Astrophysical Journal*, 669(2):1262, 2007. (Zitiert auf den Seiten [18](#), [20](#), [28](#), [32](#), [59](#), [66](#), [79](#) und [109](#).)
- Ya. Pavlyuchenkov, D. Wiebe, B. Shustov, Th. Henning, R. Launhardt, und D. Semenov. Molecular Emission Line Formation in Prestellar Cores. *The Astrophysical Journal*, 689:335–350, December 2008. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/592564. (Zitiert auf Seite [28](#).)
- Ya N. Pavlyuchenkov und B. M. Shustov. A method for molecular-line radiative-transfer computations and its application to a two-dimensional model for the starless core L1544. *Astronomy Reports*, 48(4):315–326, 2004. (Zitiert auf den Seiten [28](#) und [39](#).)
- Dirk Petry und CASA Development Team. Analysing ALMA Data with CASA. *Astronomical Data Analysis Software and Systems XXI*, 461:849, September 2012. (Zitiert auf Seite [74](#).)
- V. Piétu, A. Dutrey, und S. Guilloteau. Probing the structure of protoplanetary disks: a comparative study of DM Tau, LkCa 15, and MWC 480. *Astronomy and Astrophysics*, 467(1):163–178, May 2007. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361:20066537. (Zitiert auf den Seiten [39](#), [72](#), [80](#), [106](#), [110](#) und [111](#).)
- C. Pinte, T. J. Harries, M. Min, A. M. Watson, C. P. Dullemond, P. Woitke, F. Ménard, und M. C. Durán-Rojas. Benchmark problems for continuum radiative transfer. High optical depths, anisotropic scattering, and polarisation. *Astronomy and Astrophysics*, 498:967–980, May 2009. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/200811555. (Zitiert auf Seite [46](#).)

Klaus M. Pontoppidan, Rowin Meijerink, Cornelis P. Dullemond, und Geoffrey A. Blake. A New Raytracer for Modeling AU-Scale Imaging of Lines from Protoplanetary Disks. *The Astrophysical Journal*, 704:1482–1494, October 2009. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/704/2/1482. (Zitiert auf Seite [46](#).)

Chunhua Qi, Jacqueline E. Kessler, David W. Koerner, Anneila I. Sargent, und Geoffrey A. Blake. Continuum and CO/HCO⁺ Emission from the Disk Around the T Tauri Star LkCa 15. *The Astrophysical Journal*, 597:986–997, November 2003. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/378494. (Zitiert auf Seite [18](#).)

Chunhua Qi, Karin I. Öberg, David J. Wilner, und Katherine A. Rosenfeld. First Detection of c-C₃H₂ in a Circumstellar Disk. *The Astrophysical Journal Letters*, 765:L14, March 2013. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/2041-8205/765/1/L14. (Zitiert auf den Seiten [9](#) und [72](#).)

T. P. Robitaille. On the modified random walk algorithm for Monte-Carlo radiation transfer. *Astronomy and Astrophysics*, 520:70, September 2010. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201015025. (Zitiert auf Seite [37](#).)

T. P. Robitaille. HYPERION: an open-source parallelized three-dimensional dust continuum radiative transfer code. *Astronomy and Astrophysics*, 536:79, December 2011. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201117150. (Zitiert auf den Seiten [38](#) und [134](#).)

Katherine A. Rosenfeld, Sean M. Andrews, A. Meredith Hughes, David J. Wilner, und Chunhua Qi. A Spatially Resolved Vertical Temperature Gradient in the HD 163296 Disk. *The Astrophysical Journal*, 774:16, September 2013. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/774/1/16. (Zitiert auf Seite [72](#).)

Hermann-Josef Röser, Werner Tscharnuter, und Hans-Heinrich Voigt. *Abriss der Astronomie*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 6. wesentlich überarb. u. erw. Auflage edition, March 2012. ISBN 978-3-527-40736-1. (Zitiert auf Seite [13](#).)

J. P. Ruge, S. Wolf, A. L. Uribe, und H. H. Klahr. Tracing large-scale structures in circumstellar disks with ALMA. *Astronomy & Astrophysics*, 549:A97, January 2013. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201220390. (Zitiert auf den Seiten [12](#), [27](#), [71](#), [75](#), [78](#), [87](#), [99](#) und [103](#).)

Jan Philipp Ruge, Sebastian Wolf, Ana L. Uribe, und Hubert H. Klahr. Planet-induced disk structures: A comparison between (sub)mm and infrared radiation. *Astronomy and Astrophysics*, 572:L2, December 2014. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361/201322994. (Zitiert auf den Seiten [9](#), [27](#) und [71](#).)

G. B. Rybicki und D. G. Hummer. An accelerated lambda iteration method for multilevel radiative transfer. I - Non-overlapping lines with background continuum. *Astronomy and Astrophysics*, 245:171–181, May 1991. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite [15](#).)

- J. Sauter und S. Wolf. Observing dust settling and coagulation in circumstellar discs: Selected constraints from high resolution imaging. *Astronomy & Astrophysics*, 527: A27, March 2011. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/201014546. (Zitiert auf Seite [27](#).)
- J. Sauter, S. Wolf, R. Launhardt, D. L. Padgett, K. R. Stapelfeldt, C. Pinte, G. Duchêne, F. Ménard, C.-E. McCabe, K. Pontoppidan, M. Dunham, T. L. Bourke, und J.-H. Chen. The circumstellar disc in the Bok globule CB 26. *Astronomy and Astrophysics*, 505(3):1167–1182, October 2009. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361/200912397. (Zitiert auf den Seiten [10](#), [21](#) und [108](#).)
- A. A. Schegerer, S. Wolf, Th. Ratzka, und Ch. Leinert. The T Tauri star RY Tauri as a case study of the inner regions of circumstellar dust disks. *Astronomy and Astrophysics*, 478(3):779–793, February 2008. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361:20077049. (Zitiert auf Seite [27](#).)
- F. L. Schöier, F. F. S. van der Tak, E. F. van Dishoeck, und J. H. Black. An atomic and molecular database for analysis of submillimetre line observations . *Astronomy and Astrophysics*, 432(1):369–379, March 2005. ISSN 0004-6361, 1432-0756. doi: 10.1051/0004-6361:20041729. (Zitiert auf Seite [39](#).)
- D. Semenov und D. Wiebe. Chemical Evolution of Turbulent Protoplanetary Disks and the Solar Nebula. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 196:25, October 2011. ISSN 0067-0049. doi: 10.1088/0067-0049/196/2/25. (Zitiert auf den Seiten [40](#) und [73](#).)
- D. Semenov, Ya. Pavlyuchenkov, Th. Henning, E. Herbst, und E. van Dishoeck. On the Feasibility of Chemical Modeling of a Proplanetary Disk. *Baltic Astronomy*, 13: 454–458, 2004. ISSN 1021-6766. (Zitiert auf Seite [109](#).)
- D. Semenov, Ya. Pavlyuchenkov, K. Schreyer, Th. Henning, C. Dullemond, und A. Bacmann. Millimeter Observations and Modeling of the AB Aurigae System. *The Astrophysical Journal*, 621:853–874, March 2005. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/427725. (Zitiert auf Seite [109](#).)
- D. Semenov, D. Wiebe, und Th. Henning. Gas-Phase CO in Protoplanetary Disks: A Challenge for Turbulent Mixing. *The Astrophysical Journal Letters*, 647:L57–L60, August 2006. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/507096. (Zitiert auf Seite [79](#).)
- D. Semenov, Ya. Pavlyuchenkov, Th. Henning, S. Wolf, und R. Launhardt. Chemical and Thermal Structure of Protoplanetary Disks as Observed with ALMA. *The Astrophysical Journal Letters*, 673:L195–L198, February 2008. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/528795. (Zitiert auf den Seiten [59](#), [60](#), [61](#), [63](#), [71](#), [136](#), [137](#), [164](#) und [169](#).)
- N. I. Shakura und R. A. Sunyaev. Black holes in binary systems. Observational appearance. *Astronomy and Astrophysics*, 24:337–355, 1973. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf den Seiten [10](#), [59](#) und [105](#).)

Frank H. Shu, Fred C. Adams, und Susana Lizano. Star formation in molecular clouds - Observation and theory. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 25: 23–81, 1987. ISSN 0066-4146. doi: 10.1146/annurev.aa.25.090187.000323. (Zitiert auf Seite 5.)

G. G. Stokes. On the Change of Refrangibility of Light. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 142:463–562, January 1852. ISSN 0261-0523,. doi: 10.1098/rstl.1852.0022. (Zitiert auf Seite 35.)

Karen M. Strom, Stephen E. Strom, Suzan Edwards, Sylvie Cabrit, und Michael F. Skrutskie. Circumstellar material associated with solar-type pre-main-sequence stars - A possible constraint on the timescale for planet building. *The Astronomical Journal*, 97:1451–1470, May 1989. ISSN 0004-6256. doi: 10.1086/115085. (Zitiert auf Seite 6.)

Stephen E. Strom, Suzan Edwards, und Michael F. Skrutskie. Evolutionary time scales for circumstellar disks associated with intermediate- and solar-type stars. pages 837–866, 1993. (Zitiert auf Seite 6.)

Shu Tezuka, Pierre L'Ecuyer, und Raymond Couture. On the Lattice Structure of the Add-with-carry and Subtract-with-borrow Random Number Generators. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 3(4):315–331, October 1993. ISSN 1049-3301. doi: 10.1145/159737.159749. (Zitiert auf Seite 135.)

W.-F. Thi, G.-J. van Zadelhoff, und E. F. van Dishoeck. Organic molecules in protoplanetary disks around T Tauri and Herbig Ae stars. *Astronomy and Astrophysics*, 425: 955–972, October 2004. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:200400026. (Zitiert auf den Seiten 72 und 107.)

N. J. Turner, S. Fromang, C. Gammie, H. Klahr, G. Lesur, M. Wardle, und X.-N. Bai. Transport and Accretion in Planet-Forming Disks. *Protostars and Planets VI*, pages 411–432, 2014. doi: 10.2458/azu_uapress_9780816531240-cho18. (Zitiert auf Seite 106.)

Albrecht Unsöld und Bodo Baschek. *Der neue Kosmos*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002. ISBN 978-3-662-06530-3 978-3-662-06529-7. (Zitiert auf den Seiten 13, 39, 143 und 171.)

A. L. Uribe, H. Klahr, M. Flock, und Th. Henning. Three-dimensional Magnetohydrodynamic Simulations of Planet Migration in Turbulent Stratified Disks. *The Astrophysical Journal*, 736:85, August 2011. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/736/2/85. (Zitiert auf den Seiten 73, 75 und 103.)

M. Šolc. Monte Carlo modelling of the radiation transport in polydispersion media. *Acta Universitatis Caroliae. Mathematica et Physica*, 21:19–32, 1980. (Zitiert auf Seite 22.)

- F. F. S. van der Tak, J. H. Black, F. L. Schöier, D. J. Jansen, und E. F. van Dishoeck. A computer program for fast non-LTE analysis of interstellar line spectra. *Astronomy and Astrophysics*, 468(2):627–635, June 2007. ISSN 0004-6361, 1432-0746. doi: 10.1051/0004-6361:20066820. (Zitiert auf den Seiten [20](#) und [39](#).)
- G.-J. van Zadelhoff, C. P. Dullemond, F. F. S. van der Tak, J. A. Yates, S. D. Doty, V. Ossenkopf, M. R. Hogerheijde, M. Juvela, H. Wiesemeyer, und F. L. Schöier. Numerical methods for non-LTE line radiative transfer: Performance and convergence characteristics. *Astronomy and Astrophysics*, 395:373–384, November 2002. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20021226. (Zitiert auf Seite [28](#).)
- S. J. Weidenschilling. Dust to planetesimals - Settling and coagulation in the solar nebula. *Icarus*, 44:172–189, October 1980. ISSN 0019-1035. doi: 10.1016/0019-1035(80)90064-0. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- S. J. Weidenschilling und Jeffrey N. Cuzzi. Formation of planetesimals in the solar nebula. pages 1031–1060, 1993. (Zitiert auf Seite [6](#).)
- Alfred Weigert, Heinrich J. Wendker, und Lutz Wisotzki. *Astronomie und Astrophysik: Ein Grundkurs*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Bergstr, 5. aktualis. u. erw. Auflage edition, October 2009. ISBN 978-3-527-40793-4. (Zitiert auf Seite [13](#).)
- Joseph C. Weingartner und B. T. Draine. Dust Grain-Size Distributions and Extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud. *The Astrophysical Journal*, 548:296–309, February 2001. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/318651;. (Zitiert auf den Seiten [6](#), [21](#), [22](#) und [78](#).)
- A. Weiss, F. Walter, und N. Z. Scoville. The spectral energy distribution of CO lines in M 82. *Astronomy and Astrophysics*, 438:533–544, August 2005. ISSN 0004-6361. doi: 10.1051/0004-6361:20052667. (Zitiert auf Seite [19](#).)
- Barbara A. Whitney. Monte Carlo Radiative Transfer. *arXiv:1104.4990 [astro-ph]*, April 2011. doi: 10.1016/j.icarus.2012.11.018. (Zitiert auf Seite [34](#).)
- D. J. Wilner, P. T. P. Ho, J. H. Kastner, und L. F. Rodríguez. VLA Imaging of the Disk Surrounding the Nearby Young Star TW Hydrae. *The Astrophysical Journal Letters*, 534:L101–L104, May 2000. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/312642. (Zitiert auf Seite [120](#).)
- R. N. Wilson, F. Franzia, und L. Noethe. Active optics. I. A system for optimizing the optical quality and reducing the costs of large telescopes. *Journal of Modern Optics*, 34:485–509, 1987. ISSN 0950-0340. (Zitiert auf Seite [8](#).)
- S. Wolf. MC₃D-3D continuum radiative transfer, Version 2. *Computer Physics Communications*, 150:99–115, February 2003a. ISSN 0010-4655. doi: 10.1016/S0010-4655(02)00675-6;. (Zitiert auf den Seiten [27](#), [34](#), [35](#), [95](#) und [120](#).)

- S. Wolf. Efficient Radiative Transfer in Dust Grain Mixtures. *The Astrophysical Journal*, 582:859–868, January 2003b. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/344710. (Zitiert auf Seite 21.)
- S. Wolf und N. V. Voshchinnikov. Mie scattering by ensembles of particles with very large size parameters. *Computer Physics Communications*, 162:113–123, September 2004. ISSN 0010-4655. doi: 10.1016/j.cpc.2004.06.070. (Zitiert auf den Seiten 22 und 35.)
- S. Wolf, Th. Henning, und B. Stecklum. Multidimensional self-consistent radiative transfer simulations based on the Monte-Carlo method. *Astronomy and Astrophysics*, 349:839–850, September 1999. ISSN 0004-6361. (Zitiert auf Seite 27.)
- S. Wolf, F. Gueth, Th Henning, und W. Kley. Interferometric Detection of Planets/-Gaps in Protoplanetary Disks. *Scientific Frontiers in Research on Extrasolar Planets*, Vol 294:257–260, 2002. (Zitiert auf den Seiten 9 und 21.)
- Sebastian Wolf und Gennaro D'Angelo. On the Observability of Giant Protoplanets in Circumstellar Disks. *The Astrophysical Journal*, 619:1114–1122, February 2005. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/426662. (Zitiert auf Seite 71.)
- Sebastian Wolf und Lynne A. Hillenbrand. Model Spectral Energy Distributions of Circumstellar Debris Disks. I. Analytic Disk Density Distributions. *The Astrophysical Journal*, 596:603–620, October 2003. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/377638. (Zitiert auf Seite 48.)
- Sebastian Wolf, Deborah L. Padgett, und Karl R. Stapelfeldt. The circumstellar disk of the butterfly star in Taurus. *The Astrophysical Journal*, 588(1):373, 2003. (Zitiert auf den Seiten 10 und 108.)
- Kenneth Wood, Michael J. Wolff, J. E. Bjorkman, und Barbara Whitney. The Spectral Energy Distribution of HH 30 IRS: Constraining the Circumstellar Dust Size Distribution. *The Astrophysical Journal*, 564:887–895, January 2002. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/324285. (Zitiert auf Seite 10.)
- Mark C. Wyatt. Evolution of Debris Disks. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 46:339–383, September 2008. ISSN 0066-4146. doi: 10.1146/annurev.astro.45.051806.110525. (Zitiert auf Seite 7.)
- C. K. Xu, C. Cao, N. Lu, Y. Gao, P. van der Werf, A. S. Evans, J. M. Mazzarella, J. Chu, S. Haan, T. Diaz-Santos, R. Meijerink, Y.-H. Zhao, P. Appleton, L. Armus, V. Charmandaris, S. Lord, E. J. Murphy, D. B. Sanders, B. Schulz, und S. Stierwalt. ALMA Observations of Warm Molecular Gas and Cold Dust in NGC 34. *The Astrophysical Journal*, 787:48, May 2014. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/787/1/48. (Zitiert auf Seite 9.)

Hao Yang, Gregory J. Herczeg, Jeffrey L. Linsky, Alexander Brown, Christopher M. Johns-Krull, Laura Ingleby, Nuria Calvet, Edwin Bergin, und Jeff A. Valenti. A Far-ultraviolet Atlas of Low-resolution Hubble Space Telescope Spectra of T Tauri Stars. *The Astrophysical Journal*, 744:121, January 2012. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/744/2/121. (Zitiert auf Seite [7](#).)

F. Yusef-Zadeh, M. Morris, und R. L. White. Bipolar reflection nebulae - Monte Carlo simulations. *The Astrophysical Journal*, 278:186–194, March 1984. ISSN 0004-637X. doi: 10.1086/161780. (Zitiert auf Seite [44](#).)

S. Zeidler, H. Mutschke, und Th. Posch. Temperature-dependent Infrared Optical Constants of Olivine and Enstatite. *The Astrophysical Journal*, 798:125, January 2015. ISSN 0004-637X. doi: 10.1088/0004-637X/798/2/125. (Zitiert auf Seite [134](#).)

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

- Abbildung 2.1 1.3 mm Kontinuum-Beobachtung der protoplanetaren Scheibe um HL Tau mit ALMA [ALMA Partnership 2015] 5
- Abbildung 3.1 Definition der aus einem Schwarzkörperstrahler (oben) resultierenden Wahrscheinlichkeitsdichte (Mitte) und Wahrscheinlichkeitsverteilung (unten). 26
- Abbildung 4.1 Schematische Darstellung der Linienverschiebung aufgrund des Doppler-Effekts einer rotierenden Scheibe. Projezierte Geschwindigkeitsbeiträge in Richtung des Beobachters bewirken eine Blauverschiebung, vom Beobachter weg eine Rotverschiebung der Linie. Ohne Geschwindigkeitskomponente ($v = 0$) ist die Linie nicht verschoben. Durch die Rotation der Scheibe ergibt sich typischerweise ein Spektrum mit zwei Maxima (rechts). 40
- Abbildung 4.2 Darstellung des Zusammenhangs zwischen dem globalen Koordinatensystem und dem des Beobachters. 42
- Abbildung 5.1 Temperaturverlauf im optisch dünnen Fall. Dargestellt ist die mit *Mol3D* berechnete Lösung (blau) sowie die semi-analytische Lösung (schwarz, Gl. 5.1). Die Abweichungen (oben) betragen weniger als 1 %. 49
- Abbildung 5.2 Mittelebenen-Temperatur einer typischen protoplanetaren Scheibe um einen Vor-Hauptreihenstern (T Tauri). *Mol3D* (rot) sowie *MC3D* (blau) berechnen sehr vergleichbare Ergebnisse. Die Unterschiede der Ergebnisse der beiden Programme lassen sich auf die jeweils zugrunde liegenden Monte-Carlo-Methoden zurückführen. Die Abweichungen liegen in diesem Fall am Innenrand bei maximal 10% sowie am Außenrand der Scheibe bei maximal 2 %. 50
- Abbildung 5.3 Vergleich der spektralen Energieverteilungen berechnet von *Mol3D* (rot) und *MC3D* (schwarze Kreuze). Die Abweichungen betragen weniger als 5 %. 52
- Abbildung 5.4 Vergleich der spektralen Energieverteilungen berechnet mit monochromatischem Strahlungstransport (blau) und mit 300 Wellenlängenkanälen (grün), die durch das verwendete Monte-Carlo-Verfahren statistisch ausgelost werden. 54
- Abbildung 5.5 Stokes-Komponenten I, Q, U und V im Vergleich mit *MC3D* für ein Modell einer typischen protoplanetaren Scheibe in Draufsicht ($i = 0^\circ$). 56

- Abbildung 5.6 Azimutal gemittelter Verlauf des Flusses der linearen Polarisierung von *Mol3D* im Vergleich zu MC₃D. 57
- Abbildung 5.7 Fluss der linearen Polarisation im Vergleich mit MC₃D für ein Modell einer typischen protoplanetaren Scheibe. Die Scheibe erscheint einmal in Draufsicht (obere Reihe) und einmal mit einer Inklination von $i = 80^\circ$. 58
- Abbildung 5.8 Verwendete Scheibenmodelle für den Vergleich von *Mol3D* mit URAN(IA), sowie mit der Studie von Semenov u. a. [2008]. In der rechten Spalte sind die drei betrachteten Temperaturverteilungen dargestellt. Weitere Details sind dem Text zu entnehmen. 61
- Abbildung 5.9 HCO⁺ (4-3) Geschwindigkeitskarten für sechs verschiedene Scheibenmodelle bei einer Inklination von 60° . Dargestellt ist der $v = -0.77$ km/s Geschwindigkeitskanal. Die Intensität ist in Einheiten der Helligkeitstemperatur durch die Farbskalierung gegeben. Die Besetzungszahlen wurden mit der LVG-Methode berechnet. 62
- Abbildung 5.10 Mit der LTE-, FEP- und LVG-Methode berechnete HCO⁺ Besetzungszahlen für eine typische protoplanetare Scheibe mit vertikalem Temperaturgradienten. Dargestellt ist die Anregungstemperatur (Formel 3.16) für ausgewählte mit ALMA beobachtbare HCO⁺-Übergänge. 65
- Abbildung 5.11 Vergleich des HCO⁺ (4-3) Spektrums für verschiedene Berechnungsmethoden der Besetzungszahlen. Durchgezogene Linien stehen für die Ergebnisse mit URAN(IA) und Punkte markieren die Ergebnisse von *Mol3D*. Unterschiedliche Farben kennzeichnen die Berechnungsmethoden. Beide Programme berechnen sehr vergleichbare Spektren (die Unterschiede sind geringer als 0.5%). 67
- Abbildung 6.1 Beispiel einer Hydrodynamik-Simulation mit eingebettetem Planeten (Massenverhältnis von $M_{\text{Planet}}/M_{\text{Stern}} = 0.001$) und einem Skalierungsfaktor von $k = 16$. Dargestellt sind die Schnitte durch die xy- bzw. xz-Ebene und die Dichte ist logarithmisch durch die Farbskala gegeben. Durch die Präsenz des Planeten hat sich eine prominente Lücke ausgebildet (siehe linkes Bild). Allerdings sind die oberen Schichten der Scheibe kaum durch den Planeten beeinflusst (rechtes Bild). 77
- Abbildung 6.2 Ideale ¹²C¹⁶O (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Die Lücke ist deutlich zu erkennen, besonders in den Linienflügeln. Auch der markante Spiralarm kann bei $v = \pm 400$ m/s identifiziert werden. 82

- Abbildung 6.3 Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der optischen Tiefe kommt die Linienemission nur aus den obersten Scheibenschichten, daher ist die Scheibenlücke kaum sichtbar. Nichtsdestotrotz ist die Flussdichte vergleichbar mit dem Modell 100-fach geringerer Scheibenmasse (Abb. 6.2). [84](#)
- Abbildung 6.4 Ideale $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-3} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der geringen Häufigkeit dieses Kohlenstoffmonoxid-Isotopologs ist die Lücke, im Gegensatz zum optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ Übergang (vgl. Abb. 6.2), deutlich zu erkennen. [85](#)
- Abbildung 6.5 Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten bei einer Scheibeninklination von 10° . Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Aufgrund der Scheibeninklination und der Doppler-verschobenen Linienemission erscheint die Scheibenlücke nicht als symmetrischer Ring wie im Fall der Kontinuumsstrahlung. [86](#)
- Abbildung 6.6 Ideale HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten bei $v = 150 \text{ m/s}$. Beide Scheiben weisen eine Inklination zum Beobachter von 10° auf. Die räumlich aufgelösten Linienemissionen des gestörten (links) und ungestörten (rechts) Scheibenmodells weisen ähnliche Muster auf, die nicht eindeutig die Existenz einer Scheibenlücke beweisen. [87](#)
- Abbildung 6.7 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeits-integrierte Flussdichte der Geschwindigkeitskarte aus Abb. 6.5. Aufgrund der Integration ist der Einfluss und damit das Muster des zugrunde liegenden Geschwindigkeitsfelds verschwunden. [88](#)
- Abbildung 6.8 Ideale $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen Herbig Ae-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten bei einer Scheibeninklination von 10° . Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_{\odot}$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. [89](#)

Abbildung 6.9 Illustration der Methode um eine Scheibenlücke nachzuweisen. In blau ist ein radialer Schnitt durch die HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarte (Abb. 6.15, $v = 0.0 \text{ m/s}$). Eine Lücke gilt als eindeutig detektiert, wenn die Lückentiefe größer als das Dreifache des Rauschlevels des betrachteten Übergangs ist. Für diesen dargestellten Fall ist die Lücke mit einer Signifikanz von $\sim 7\sigma$ deutlich zu identifizieren. 90

Abbildung 6.10 σ -gewichtete, ideale Lückentiefe in Abhängigkeit der Geschwindigkeit. Die Lücke kann mit dem optisch dicken $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang (blau) nur in den Linienflügeln nachgewiesen werden (bei $v = \pm 700 \text{ m/s}$). Im Gegensatz dazu erlaubt der $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) Übergang (grün) die Lücke über einen breiten Geschwindigkeitsbereich, im Herbig Ae-Fall auch im Linienzentrum, zu detektieren. Allerdings ergibt sich die signifikanteste Linientiefe für beide Sterne mit dem CS (7-6) Übergang bei $\pm 350 \text{ m/s}$. 91

Abbildung 6.11 Übersichtskarten zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken im idealen Fall. Es werden alle 32 betrachteten Übergänge ausgewertet und für jede Scheibenkonfiguration (Masse, Ausdehnung) der Übergang bestimmt, bei dem die Lücke am signifikantesten erscheint. Links sind die Ergebnisse mit dem T Tauri-Stern und rechts mit dem Herbig Ae-Stern dargestellt. Für die massereichsten Scheiben sind alle Übergänge optisch dick und die Linienemission stammt nur aus der ungestörten Scheibenoberfläche. Die Lücken dieser Scheiben lassen sich daher besser durch Kontinuum-Beobachtungen im (Sub-)Millimeter nachweisen. 93

Abbildung 6.12 Übersichtskarten analog zu Abbildung 6.11 nur mit dem Herbig Ae-Stern als zentrale Strahlungsquelle. 94

Abbildung 6.13 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Im Vergleich mit den idealen Geschwindigkeitskarten sind komplexe Scheibenstrukturen aufgrund der Faltung verschwunden. Trotzdem kann die Lücke deutlich in den Linienflügeln ($v = \pm 300 \text{ m/s}$) nachgewiesen werden. 96

Abbildung 6.14 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiter-ähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE und die Scheibeninklination 10° . 97

Abbildung 6.15 HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten eines Scheibenmodells in Draufsicht um einen T Tauri-Stern mit eingebettetem Jupiterähnlichen Planeten wie es mit ALMA in Konfiguration 14 (1.6 km max. Basislinie) beobachtet werden könnte. Die Scheibenmasse beträgt $2.67 \cdot 10^{-5} M_\odot$ und der Außenrand der Scheibe 144 AE. Verglichen mit der simulierten $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Beobachtung, ist die Flussdichte aufgrund der niedrigeren relativen Häufigkeit von HCO^+ um ca. 35 % geringer. Trotzdem ist die Lücke selbst im Linienzentrum eindeutig nachweisbar. [98](#)

Abbildung 6.16 Aus den simulierten ALMA-Karten abgeleitete Lückentiefe in Einheiten von σ in Abhängigkeit der Geschwindigkeit (vgl. Abb. 6.10 für den idealen Fall). Die signifikanteste Linientiefe von $\sim 25 \sigma$ wird für den Herbig Ae-Stern (rechts) mit dem CS (7-6) Übergang bei $\pm 350 \text{ m/s}$ und $\sim 11 \sigma$ für den T Tauri-Stern (links) erreicht. [99](#)

Abbildung 6.17 Übersichtskarten zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken mit Moleküllinien für den T Tauri-Fall. Jede Spalte steht für eine ALMA-Konfiguration und jede Reihe repräsentiert einen der fünf betrachteten Übergänge. Die inneren Achsen beschreiben die Scheibenausdehnung mit Skalierungsfaktor k und die Scheibenmasse. Die Lückentiefe ist durch die Farbskalierung in Einheiten des Hintergrundrauschens σ gegeben. Die Ergebnisse zeigen, dass die Lückendetektion auf massearme Scheiben ($M_{\text{Scheibe}} \leq 10^{-3}$) beschränkt ist und folgen denen des idealen Falls. [100](#)

Abbildung 6.18 In Analogie zu Abbildung 6.17 nur mit einem Herbig Ae-Stern als zentrale Stahlungsquelle. Die geringen qualitativen Unterschiede lassen sich auf die deutlich höhere Leuchtkraft und damit höhere Scheibentemperatur zurückführen (vgl. Abschnitt 6.3.1) [101](#)

Abbildung 7.1 Schnitt senkrecht zur Scheibenmittelebene. Farblich codiert ist die vertikale Komponente des Geschwindigkeitsfelds, welche sich aus den MHD-Simulationen ergibt. Deutlich ist zu erkennen, dass die Scheibenmittelebene kaum vertikale Geschwindigkeiten aufweist, da in diesen Zonen die MRI, aufgrund des wenig ionisierten Gases, nicht wirken kann. Anzumerken ist, dass im Fall perfekter Kepler-Rotation keine vertikale Komponente existiert. Daher kann diese Geschwindigkeit als Abweichung von der Kepler-Rotation interpretiert werden. [107](#)

Abbildung 7.2 Darstellung der HCO^+ -Häufigkeitsverteilung relativ zu molekularem Wasserstoff (H_2). Diese geschichtete rotationssymmetrische Verteilung ist ein Ergebnis der Studie von Dzyurkevich u. a. [2013]. [110](#)

- Abbildung 7.3 Ideale Linienspektren für $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2), HCO^+ (4-3), CS (7-6) und $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (3-2) unter Verwendung des *lokalen* Modells zur Beschreibung der Turbulenz. [113](#)
- Abbildung 7.4 $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (3-2) Übergang für ausgewählte Geschwindigkeiten. Obere Reihe: *Globales* Modell mit einer turbulenten Geschwindigkeit von $v_{\text{turb}} = 95 \text{ m/s}$. Untere Reihe: *Lokales* Modell. Die Flussdichten beider Modelle sind sehr vergleichbar. Allerdings ist das *globale* Modell nicht in der Lage die turbulenten Strömungen zu reproduzieren. [114](#)
- Abbildung 7.5 Geschwindigkeitskarten der vier in dieser Studie betrachteten Rotationsübergänge für das D2G_e-2-Modell unter Verwendung des *lokalen*-Modells. Ausgewählte turbulente Strömungszellen sind zur Verdeutlichung mit einem roten Kreis versehen. [115](#)
- Abbildung 7.6 Geschwindigkeitskarten analog zu Abbildung 7.5 nur mit einer Scheibeninklination von $i = 60^\circ$. [116](#)
- Abbildung 7.7 Geschwindigkeitskarten der vier betrachteten Rotationsübergänge für das D2G_e-4-Modell unter Verwendung des *lokalen*-Modells. Es lassen sich keine deutlich separierten Strömungszellen identifizieren. [117](#)
- Abbildung 7.8 Ideale HCO^+ (4-3) Geschwindigkeitskarten bei $v = -250 \text{ m/s}$ für vier Scheibenmodelle, basierend auf dem D2G_e-2-Modell der MHD-Simulationen. Oben links: *Globales* Modell, oben rechts: Kontinuum bei $\lambda = 880 \mu\text{m}$, unten links: *Lokales* Modell, unten rechts: *Lokales* Modell mit geschichteter HCO^+ -Verteilung. [118](#)
- Abbildung 7.9 Radialer Schnitt aller vier in Abbildung 7.8 dargestellten Flusskarten. Bis auf den inneren Rand zeigen die *lokalen* HCO^+ -Modelle mit geschichteter und konstanter Häufigkeitsverteilung qualitativ sehr vergleichbare Strukturen. [119](#)
- Abbildung 7.10 Simulierte ALMA-Beobachtungen des HCO^+ (4-3) Übergangs für verschiedene Scheibenentfernung (von oben nach unten ansteigend) und Geschwindigkeitskanäle. Die Flussdichte in Einheiten der Sensitivität σ ist durch die Farbskala gegeben. Die turbulenten Strömungszellen (exemplarisch ist eine mit dem roten Kreis markiert) sind bis zu einer Entfernung von ca. $\sim 100 \text{ pc}$ nachweisbar. [122](#)
- Abbildung A.1 Vergleich der Berechnungsgeschwindigkeiten zwischen *Mol3D* und *MC3D* für eine typische Temperaturverteilung. Auf der y-Achse ist die Zeit dargestellt, die das jeweilige Programm benötigt, um ein zugehöriges χ^2 (x-Achse) zu erreichen. Die Punkte repräsentieren die gemessenen Zeiten (blau für *Mol3D* und rot für *MC3D*) und die Linien zeigen die zugehörige beste Anpassung. [132](#)

- Abbildung A.2 Effizienz der Parallelisierung von *Mol3D* mit OpenMP. Die gemessene Geschwindigkeitssteigerung ist nahezu ideal und beträgt für dieses konkrete Scheibenmodell $s_{16} = 15.79$ bei der Verwendung von 16 CPU-Kernen. [134](#)
- Abbildung A.3 Abbildung 1 der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#). Dargestellt ist das verwendete Scheibenmodell, links die DichteVerteilung, in der Mitte die TemperaturVerteilung und rechts die relative Molekülhäufigkeit. [137](#)
- Abbildung A.4 Abbildung 2 der Studie von [Semenov u. a. \[2008\]](#). Dargestellt ist die $v = +0.77 \text{ km/s}$ Geschwindigkeitskarte für jeweils ein Scheibenmodell. Für weitere Details siehe Abschnitt [5.4.1.](#) [137](#)
- Abbildung A.5 Vergleich der Ergebnisse der linearen Streupolarisation mit [Kirchschlager und Wolf \[2014\]](#) mit verwendeter *Peel-off*-Technik. [138](#)
- Abbildung A.6 Vergleich der Ergebnisse der linearen Streupolarisation mit [Kirchschlager und Wolf \[2014\]](#) ohne *Peel-off*-Technik. [139](#)
- Abbildung A.7 Übersichtskarte der in den idealen Geschwindigkeitskarten abgeleiteten Lückentiefe für die fünf betrachteten Moleküle und insgesamt 32 Linienübergänge. Die zentrale Strahlungsquelle ist ein T Tauri-Stern. [140](#)
- Abbildung A.8 Übersichtskarte der in den idealen Geschwindigkeitskarten abgeleiteten Lückentiefe für die fünf betrachteten Moleküle und insgesamt 32 Linienübergänge. Die zentrale Strahlungsquelle ist ein Herbig Ae-Stern. [141](#)

TABELLENVERZEICHNIS

Tabelle 4.1	Übersicht der in <i>Mol3D</i> verwendbaren Molekülsorten	38
Tabelle 5.1	Verwendete Stern- und Scheibenparameter für die Vergleichsstudie zur Kontinuumsstrahlung	51
Tabelle 5.2	Verwendete Stern- und Scheibenparameter für die Vergleichsstudie zur Linienstrahlung	60
Tabelle 6.1	Vergleich der Gitterparameter der beiden Programme. Der originale Datensatz der Hydrodynamik-Simulationen wurde reduziert, um die Daten effektiv mit <i>Mol3D</i> verarbeiten zu können.	76
Tabelle 6.2	Eigenschaften der betrachteten Vor-Hauptreihensterne	78
Tabelle 6.3	Parameterraum der betrachteten Scheibenmodelle zur Beobachtbarkeit von Scheibenlücken durch Linienbeobachtungen	79
Tabelle 6.4	Eigenschaften der in dieser Studie betrachteten Molekülübergänge. Die Sensitivität und das Niederschlagswasser (PWV) ergeben sich aus dem <i>ALMA Sensitivity Calculator</i> (Version: April 2015) für eine dreistündige Beobachtung mit 50 Einzelantennen (12 m Durchmesser).	83
Tabelle 6.5	Auflistung der verwendeten ALMA-Konfigurationen	92
Tabelle 7.1	Betrachteter Parameterraum der Scheibe um den zentralen T Tauri-Stern	109
Tabelle 7.2	Abgeleitete turbulente Geschwindigkeiten v_{turb} für die betrachteten Rotationsübergänge	112
Tabelle 7.3	Benötigte ALMA-Konfigurationen um die diskutierten turbulenten Strömungszellen (~ 10 AE Ausdehnung) für verschiedene Objektentfernungen auflösen zu können.	120
Tabelle A.1	Pseudozufallszahlengeneratoren im Überblick. Es wurden $N = 10^9$ Zufallszahlen erzeugt, die Laufzeit gemessen und ein χ^2 -Test durchgeführt.	136
Tabelle B.1	Auflistung der in dieser Arbeit verwendeten physikalischen Konstanten nach Unsold und Baschek [2002] .	143

DANKSAGUNG

Ich möchte diese Stelle nutzen, um all denjenigen meinen herzlichsten Dank auszusprechen, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

Einen besonderen Dank möchte ich meinem Betreuer Prof. Dr. Sebastian Wolf für die großen Freiheiten bei der Bearbeitung dieser Arbeit aussprechen. Trotzdem fühlte ich mich zu jeder Zeit sehr gut betreut, ohne dabei das Ziel aus den Augen zu verlieren.

Auch möchte ich mich insbesondere bei Frau Kuhr und Holger Boll bedanken. Sie sorgten stets für einen reibungslosen Ablauf im Institut, waren immer für ein gutes Gespräch zu haben und nie müde mich jederzeit tatkräftig zu unterstützen.

Zu guter Letzt danke ich Björn, Daniel, Tobias und Tommy sowie meinen nicht namentlich genannten Kommilitonen und Mitarbeitern der Abteilung Astrophysik für die vielen anregenden und aufschlussreichen Diskussionen und Vorschläge zu den einzelnen Abschnitten dieser Arbeit.

Mein größter Dank geht allerdings an Lena dafür, dass sie mich immer unterstützt und nie die Geduld verloren hat.

Danke

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre hiermit, dass

1. die vorliegende Arbeit, abgesehen von der Beratung durch meinen Betreuer Prof. Dr. Sebastian Wolf, in Form und Inhalt von mir selbstständig verfasst worden ist,
2. die Arbeit und ihre Teile nicht im Rahmen eines Prüfungsverfahrens vorgelegen haben oder vorliegen,
3. Teile der Arbeit veröffentlicht worden sind: Ober u. a. [2015],
4. die Arbeit unter Einhaltung der Regeln guter wissenschaftlicher Praxis der Deutschen Forschungsgemeinschaft entstanden ist.

Kiel, 21. Januar 2016

Florian Ober