Modellatmosphären und synthetische Spektren von Mira–Veränderlichen



### Diplomarbeit

vorgelegt von Matthias Dehn

Hamburger Sternwarte Universität Hamburg

> Hamburg August 2003

### Zusammenfassung

Mira–Veränderliche sind leuchtstarke und damit leicht beobachtbare kühle Riesensterne. Ihre Leuchtkraft ändert sich innerhalb einer 150 - 1000 Tage langen Periode, wobei diese im Gegensatz zur Pulsationsamplitude der Cepheiden leicht variabel ist. Durch die geringe Temperatur in der Atmosphäre kommt es zur Bildung von Molekülen und Staub, so daß die Spektren von Mira–Veränderlichen stark durch das Vorhandensein von TiO, VO und  $H_2O$  geprägt sind.

Durch Modellrechnungen ist im Rahmen dieser Arbeit die Atmosphärenstruktur von Mira-Veränderlichen näher untersucht worden. Dabei wurden Modellatmosphären mit Effektivtemperaturen in einem Bereich von 2000 bis 4500 Kelvin berechnet. Die Modellsterne haben eine Sonnenmasse und Schwerebeschleunigungen an der Oberfläche, die um zwei bis fünf Größenordnungen niedriger als die der Sonne sind.

Die Sichtbarkeit von TiO-, VO-, und H<sub>2</sub>O-Banden in den Spektren hängt vom vorhandenen Sauerstoff zur Bildung der Moleküle ab. Da CO eine hohe Dissoziationsenergie hat, wird dort Kohlenstoff und Sauerstoff fast vollständig gebunden, so daß nur überschüssiger Sauerstoff bei einem Verhältnis von Kohlenstoff zu Sauerstoff von kleiner als eins zur Bildung der deutlich sichtbaren Molekülbanden beitragen kann. Durch Variation des Verhältnisses von C/O in den Modellatmosphären ist dahingehend untersucht worden, welchen Einfluß diese Veränderung auf die Partialdrücke von CO, TiO, VO und H<sub>2</sub>O hat.

Für einige beispielhafte Modelle wurden ausgewählte Elemente (H, He, Li, C, N, O, Na, Mg, Al, Si und Ti) im nichtlokalem thermodynamischen Gleichgewicht (NLTE) gerechnet, um zu untersuchen, wie groß die Abweichungen  $(b_i)$  vom lokalem thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) sind. Im Fall von Li, Na und Ti waren die Abweichungen mit  $b_i \approx 3$  am stärksten, was beispielsweise anhand der im NLTE berechneten Natrium–D–Linie deutlich zu sehen ist. Bei den übrigen Elementen war die Abweichung vom LTE geringer und liegt in der Größenordnung  $b_i \approx 1$ .

Von fünf beobachteten Mira–Veränderlichen (R Leo, R CVn, V CVn, RZ Car und S Car) liegen phasenaufgelöste Spektren vor, die direkt mit den Modellspektren verglichen wurden. Dabei konnte deren Temperatur und C/O–Verhältnis in Abhängigkeit von der Pulsationsphase durch einen direkten Vergleich mit den Modellspektren bestimmt werden. Die Periodizität der Effektivtemperaturen und C/O–Verhältnisse konnte anhand der Vergleiche nicht bestätigt werden, da nur wenige Aufnahmen vorhanden waren, woraus der Schluß gezogen wurde, daß die Phasenauflösung zu gering war. Die bestimmte mittlere Temperatur von R Leo (2680 K), R CVn (2990 K) und S Car (3340 K) stimmt zumindest gut mit den wenigen vorhandenen Literaturwerten überein.

# Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	1			
	1.1	Mira–Veränderliche	2			
		1.1.1 Historie und Namensgebung	2			
		1.1.2 Eigenschaften	3			
	1.2	Modellrechnungen	5			
<b>2</b>	Gru	ındlagen der Physik von Sternatmosphären	7			
	2.1	Grundlegende Relationen	7			
	2.2	Energietransport	8			
		2.2.1 Strahlungstransport	8			
		2.2.2 Konvektion $\ldots$	14			
		2.2.3 Temperaturkorrektur	15			
	2.3	Atmosphärenaufbau	16			
		2.3.1 Hydrostatik	16			
		2.3.2 Die Zustandsgleichung	17			
	2.4	Linienprofile	18			
	2.5	Nichtlokales thermodynamisches Gleichgewicht (NLTE)				
	2.6	Atmosphärenmodellierung mit PHOENIX	21			
3	Mo	dellrechnungen mit PHOENIX	23			
	3.1	Parameterbereiche und Einordnung in ein HRD	24			
		3.1.1 Stellare Größen aus dem Mira–Katalog	25			
		3.1.2 Stellare Größen benachbarter Sterne aus dem HIPPARCOS-Katalog	29			
		3.1.3 Bedeutung des gewählten Bereiches für die Modellrechnungen	30			
	3.2	Stabilität der Modelle	30			
	3.3	Änderung des Kohlenstoff–Sauerstoff–Verhältnisses	31			
		3.3.1 Erstellung von Partialdrucktabellen für $C/O = 0.1 \dots 2.0 \dots 3.3$	35			
		3.3.2 Verhalten der Modelle bei C/O $\approx 1.0$	37			
		3.3.3 Verhalten der Modelle bei $C/O = 0.4$ , 0.8 und 1.2	40			
	3.4	Abhängigkeit der Spektren vom gewählten $ au$ -Gitter	44			
	3.5	NLTE–Rechnungen	50			
4	Ver	gleich mit beobachteten Spektren	55			
	4.1	Beobachtungen	55			
		4.1.1 R Leo, R CVn und V CVn	55			
		4.1.2 S Car, RZ Car	56			

	4.2	Vergleich von Modell- und Sternspektren	57				
	4.3	Ergebnisse	64				
5	Fazi	t und Ausblick	73				
$\mathbf{A}$	Erg	änzende Grundlagen	75				
	A.1	Einsteinkoeffizienten und -relationen	75				
	A.2	Koeffizienten der Stoßraten	76				
	A.3	Nomenklatur der TiO-Übergänge	76				
в	Spektren und Modelle						
	B.1	Abhängigkeit der Modellgrößen von der Masse des Modellsterns	79				
	B.2	Übersicht der w/C- und w/O-Verbindungen	82				
	B.3	Partialdrücke ausgewählter Modelle	83				
	B.4	Beobachtete, phasenaufgelöste Spektren	102				
	B.5	Übersicht der Temperaturbestimmung anhand der Spektren	108				
	B.6	Übersicht der Bestimmung von C/O anhand der Spektren	115				
$\mathbf{Li}$	terat	urverzeichnis	123				
Da	Danksagungen 131						

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Astronomie ist eine der ältesten Wissenschaften überhaupt. Dadurch, daß die Himmelserscheinungen für den Menschen unerreichbar schienen, war sie anfangs – in einigen Erscheinungsformen selbst in der Gegenwart – noch eng verknüpft mit mythologischen Vorstellungen. Durch die Regelmäßigkeiten der Planetenbewegungen und der scheinbaren Unbeweglichkeit der Sterne gab die Astronomie den Ausschlag zur Berechnung von Kalendern, der Zeitbestimmung und der Navigation. Sie wurde schon in antiken Hochkulturen zu einer exakten Wissenschaft, die ihren Höhepunkt durch Ptolemäus (ca. 150 n.Chr.) erreichte. Erst eineinhalb Jahrtausende später stellten sich neue Erkenntnisse in der Berechnung der Planetenbahnen ein, die zu einer Revolution des Weltbildes führten und sich hauptsächlich auf die Beobachtungen und Theorien von Galilei (1564-1642), Kepler (1571-1630) und Newton (1643-1727) gründeten.

Spätestens seit der ersten Bestimmung der Entfernung eines Sterns mittels trigonometrischer Parallaxe durch Bessell, Henderson und Struve im Jahre 1838 wurden die Sterne nicht mehr als bloße Lichtpunkte, sondern als sonnenähnliche Objekte angesehen. Durch die großen Entfernungen ist das einzige, was wir von den Sternen messen können, deren Licht und das daraus gewonnene Spektrum. Eine Ausnahme ist die Sonne, von der man beispielsweise die ausgehende Teilchen, den Sonnenwind, auffangen kann. Auch aus Meteoriten läßt sich auf Prozesse in Sternen schließen, wie zum Beispiel die Nukleosynthese in Supernovae (Ott und Lugmair, 2003).

Wir können viele Informationen über die physikalischen Eigenschaften der Sterne aus deren Spektren ableiten. Dazu gehören vor allem die Temperatur, Schwerebeschleunigung, Dichte und chemische Zusammensetzung der Atmosphäre. Auch Kenntnisse über das Sterneninnere resultieren letztendlich aus den Spektren.

In dieser Arbeit wurden Atmosphärenstrukturen und Spektren von langperiodisch veränderlichen Sternen, Mira–Veränderlichen, mit Hilfe des Softwarepaketes PHOENIX numerisch berechnet. Diese wurden mit beobachteten Spektren einiger Mira–Veränderlichen verglichen, um Aussagen über ihre Temperatur-, Dichte- und Druckstruktur zu erhalten. Im Folgenden ist eine grobe Aufteilung der Arbeit angegeben:

• In dem vorliegenden Abschnitt wird eine kurze historische Einführung zur Entdeckung der Mira–Veränderlichen und eine Charakteristik derselben gegeben. Weiterhin wird ein kurzer Abriß zur Entwicklung von numerischer Modellierung von Atmosphärenmodellen und -spektren dargestellt.

- Im zweiten Abschnitt werden einige physikalische Grundlagen erläutert, die für die Modellierung von Sternatmosphären von Bedeutung sind. Dabei werden hauptsächlich die Gleichungen und Methoden vorgestellt, die das PHOENIX– Programmpaket verwendet. Zum Abschluß des Kapitels wird das Programmpaket selbst vorgestellt.
- Der dritte Abschnitt beschreibt zu Beginn die stellaren Parameter wie Effektivtemperatur und Leuchtkraft, die in die Modellrechnungen eingehen und in welchem Bereich des Hertzsprung-Russell-Diagramms sich die modellierten Sterne einordnen lassen. Diese werden mit Katalogdaten eines Satzes von Mira-Veränderlichen und einer Auswahl von Sternen aus dem HIPPARCOS-Katalog verglichen. Dabei wird auch auf die Methoden zur Gewinnung der stellaren Größen in den Katalogen eingegangen.

Es wird weiterhin beschrieben, wie die Häufigkeiten von Kohlenstoff und Sauerstoff in den Modellen variiert wurden und welche Änderungen diese Variationen hervorrufen.

In einigen synthetischen Spektren traten Modellierungseffekte auf, die nicht physikalischen Urpsrungs sind und hier näher untersucht wurden. Dabei wurde ein Indikator gefunden, der das Auftreten des Effekts während der Modellrechnung anzeigt.

Für die neutralen Elemente H, He, Li, C, N, O, Na, Mg, Si und Ti wurden Rechnungen im nichtlokalen thermodynamischen Gleichgewicht (NLTE) durchgeführt, um zu prüfen, inwiefern Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) vorliegen und ob die LTE-Rechnungen Gültigkeit haben.

- Der vorletzte Abschnitt beschreibt den Vergleich der berechneten Modellspektren mit einer Reihe von Spektren die innerhalb mehrerer Helligkeitsperioden phasenaufgelöst aufgenommen wurden. Durch einen numerischen Vergleich mit den Modellspektren sollen die wichtigen beobachtbaren Größen wie Effektivtemperatur und das Kohlenstoff–Sauerstoff–Verhältnis phasenaufgelöst abgeschätzt und bzgl. der Temperaturen mit einigen Literaturwerten verglichen werden.
- Im letzten Abschnitt werden die wichtigsten Ergebnisse aus den vorhergehenden Kapiteln zusammengefaßt und kommentiert. Zusätzlich wird eine Aussicht auf mögliche weiterführende Arbeiten gegeben.

#### 1.1 Mira–Veränderliche

#### 1.1.1 Historie und Namensgebung

Aus europäischer Sicht<sup>1</sup> ist der erste langperiodische Veränderliche 1596 von einem friesischen<sup>2</sup> Amateurastronomen, David Fabricius (1564-1617), entdeckt worden. Er benutzte den Stern im Sternbild Cetus als Referenzstern zur Positionsbestimmung eines Planeten. Innerhalb eines Monats stieg die Helligkeit des Sterns von der dritten auf die zweite Größe an, um danach wieder schwächer zu werden. Da er nach weiteren zwei Monaten so

 $<sup>^{1}{\</sup>rm Zur}$ Frage, ob und wann Mira–Veränderliche bereits in der Antike oder im arabischen bzw. asiatischen Raum beobachtet wurden, empfiehlt sich Hoffleit (1997) als Überblick.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>niederländischem



Abbildung 1.1: Ausschnitt aus einer historischen Sternkarte, die das Sternbild Cetus (Walfisch) zeigt. Wie noch bis in die Neuzeit üblich, wurde auch diese Sternkarte durch aufwendige Illustrationen verziert.

lichtschwach wurde, daß er nicht mehr zu sehen war, glaubte man, daß es sich um eine Nova handelt. Zehn Jahre später wurde der Stern, der 1603 von Johann Bayer als o Ceti (kurz: o Cet<sup>3</sup>) bezeichnet wurde, von Fabricius erneut beobachtet. Abbildung 1.1 zeigt eine zeitgenössische Darstellung des Sternbildes. Ein Landsmann von Fabricius, Johann Fokkens Holwarda (1618-1651) entdeckte ihn 1638 wieder und bestimmte seine Periode zu ungefähr elf Monaten. Ein Jahr später wurde er von Johannes Hevelius von Danzig (1611-1687) ebenfalls beobachtet, der ihn drei Jahre später "Mira" — den Wunderbaren — nannte. Innerhalb der nächsten 200 Jahre wurden mit  $\chi$  Cygni, R Hydrae und R Leonis drei weitere Sterne vom Mira–Typ entdeckt. Derzeit sind laut "Combined General Catalogue of Variable Stars" (GCVS<sup>4</sup>) über 6000 Mira–Veränderliche bekannt.

#### 1.1.2 Eigenschaften

Mira–Veränderliche sind Rote Riesen mit der Besonderheit, daß ihre Leuchtkraft über lange Perioden hinweg variiert. Innerhalb einer Periode von 150 - 1000 Tagen ändert sich ihre Helligkeit mit einer Amplitude von über 2.5 Magnituden bis hin zu 10 Magnituden im visuellen und über einer Magnitude im infraroten Bereich. Von *o* Cet ist bekannt, daß seine Helligkeit den Bereich von 2.0 bis 10.1 Magnituden im Visuellen umfasst. Die Variabilitätsperiode der Mira–Veränderlichen ist nicht konstant; sie kann sich um bis zu 15% ändern. Ebenso kann auch die Amplitude im Verlaufe einiger Perioden schwanken. Abbildung 1.2 zeigt die Lichtkurve des Mira–Veränderlichen R Leonis.

Mira-Veränderliche gehören zu den Sternen, deren Wasserstoff im Kern zu Helium

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Sternbild Cetus = Walfisch

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Kholopov *et al.* (1999)



Abbildung 1.2: Links R Leonis, rechts seine Lichtkurve, die von Amateurastronomen im Laufe mehrerer Jahre aufgenommen wurde (Mattei, 2002).

fusioniert ist und das Schalenbrennen bereits eingesetzt hat. Sie sind im Hertzsprung-Russell-Diagramm nicht mehr auf der Hauptreihe, sondern im Bereich der kühlen Roten Riesen zu finden. Zu Beginn ihrer Entwicklung haben sie Anfangsmassen von ungefähr 0.6 bis 3.0 Sonnenmassen. Dadurch ist ihr charakteristischer Entwicklungsweg von der Hauptreihe in den Bereich der kühlen Riesen bestimmt. Ihre typische Effektivtemperatur beträgt 3000 K und ihr Radius typischerweise 200 – 300 Sonnenradien, was zusammen rund 2500 – 5500 Sonnenleuchtkräften entspricht. Je nach Elementhäufigkeiten in der Atmosphäre werden Mira-Veränderliche in die Typen M, S oder C eingeteilt. Dabei sind die sauerstoffreichen Sterne mit einem Verhältnis von Kohlenstoff zu Sauerstoff (C/O-Verhältnis) kleiner als eins dem M-Typ, mit C/O  $\approx 1$  dem S-Typ und die kohlenstoffreichen mit C/O > 1 dem C-Typ zugeordnet (Mattei, 1997). Bei tiefen Temperaturen unterhalb von 4000 K kommt es bereits zur Bildung von Moleküllinien, die das Spektrum dominieren. Hauptsächlich werden Titanoxid, Vanadiumoxid und Wasserdampf beobachtet, die in einigen Wellenlängenbereichen ein deutliches Pseudokontinuum bilden. Ein Beispiel für ein Spektrum mit deutlichen Banden von TiO und VO ist in Abbildung 1.3 zu sehen.

Die genaue physikalische Ursache für die Periodizität ist bislang nur schlecht verstanden. Für radiale Pulsationen scheint hauptsächlich der  $\kappa$ -Mechanismus verantwortlich zu sein. Dies ist ein Effekt bei dem sich die Temperatur und Dichte in der Atmosphäre derart ändert, daß im Zusammenspiel mit dem Strahlungsdruck eine Schwingung aufgebaut werden kann (Carroll und Ostlie, 1996). Weiterhin gibt es Hinweise auf Schockwellen, die erzeugt werden und sich durch die Atmosphäre nach außen bewegen. Die Schockwellen scheinen auch für den erheblichen Massenverlust von rund  $10^{-6}$  Sonnenmassen pro Jahr ( $M_{\odot}/yr$ ) verantwortlich zu sein (Slutz, 1976). Der Massenverlust führt zu einer starken Anreicherung der interstellaren Materie mit Kohlenstoff und Stickstoff (Wallerstein und Knapp, 1998). Durch den Massenverlust kommt es zur Bildung von zirkumstellaren Staubhüllen, deren Dicke und Zusammensetzung bei der Analyse von Mira–Spektren berücksichtigt werden muß .



Abbildung 1.3: Spektrum von R Leo im Bereich von 6400 bis 8700 Å. Der Fluß ist nicht absolut kalibriert und hat in diesem Fall willkürliche Einheiten. Drei deutliche Banden von TiO und VO sind im Spektrum markiert.

#### 1.2 Modellrechnungen

Durch eine Analyse eines Sternspektrums können wichtige physikalische Größen der Atmosphäre bestimmt werden. Aus den Kenntnissen der Atom- und Molekülphysik lassen sich anhand der Breite und Tiefe der Spektrallinien (den Linienprofilen) sowie des Verlaufs des Kontinuums Aussagen über Temperatur, Dichte und die chemische Zusammensetzung machen. Klassisch kann dazu die Methode der Wachstumskurve (curve of growth) verwendet werden. Bei dieser Methode werden jedoch nur gemittelte und keine schichtabhängigen Größen erhalten.

Um solche Größen zu erhalten, werden numerische Atmosphärenmodelle berechnet. Das bedeutet, daß die grundlegenden physikalischen Mechanismen, wie die Zustandsgleichung und der Strahlungstransport, auf numerischem Wege nachvollzogen werden. Dabei ist es wichtig, eine Formulierung dieser physikalischen Mechanismen in einem Algorithmus zu finden, der sich durch Rechner in endlicher Zeit berechnen läßt. Je weniger Rechenleistung vorhanden ist, desto eher müssen Näherungsmethoden zur Berechnung genutzt werden, die dann zu Lasten der Genauigkeit gehen. Um die Modelle zu berechnen, müssen dem Algorithmus Eingabeparameter wie Effektivtemperatur, Radius, Masse und chemische Zusammensetzung vorgegeben werden. Das erhaltene Spektrum wird dann mit gemessenen Daten verglichen, so daß die Parameter im nächsten Schritt weiter angepaßt werden können.

Die ersten großen Modellgitter wurden 1964 und 1965 von Carbon und Gingerich (1969) und Mihalas (1965) für lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) berechnet. Dies waren Modelle, bei denen nur Übergänge in das Kontinuum, aber keine individuellen Spektrallinien betrachtet wurden. Im gleichen Zeitraum gab es die ersten Modelle, die auch das nichtlokale thermodynamische Gleichgewicht (NLTE) berücksichtigten, allerdings wiederum nur für Kontinuumsprozesse. Fünf Jahre später gab es erste NLTE-Rechnungen für mehrere Energieniveaus (Auer und Mihalas, 1970).

Im folgenden Kapitel wird u.a. die klassische Lambda-Iterationsmethode erklärt. Sie bietet einen Lösungsansatz zur Behandlung des Energietransfers in Sternatmosphären, wie sie bereits 1914 von Schwarzschild angedeutet wurde (Unsöld, 1955). Sie liefert einen formalen, iterativen Lösungsansatz, der in der Praxis nur zu benutzen ist, wenn Streuungen nicht berücksichtigt werden. Ansonsten ist sie aufgrund ihres schlechten Konvergenzverhaltens nicht zu gebrauchen. Das änderte sich ab 1981, als die klassiche Lambda–Iterationsmethode von Scharmer zur "Approximierten Lambda–Iterationsmethode" durch Aufteilung (splitten) des Lambda-Operators (OS/ALI<sup>5</sup>) weiterentwickelt wurde (Scharmer, 1981). Sie ist seit Ende der 1980er die allgemein bevorzugte Methode.

Die mittlerweile recht gute Qualität der Modelle ist nicht zuletzt dadurch entstanden, daß die Qualität von Beobachtungsdaten durch verbesserte Instrumente ebenfalls stark zugenommen hat. Denn so lassen sich Besonderheiten in den Spektren finden, die dann in den nächsten Modellen berücksichtigt werden können.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Operator splitting/Approximate lambda iteration

### Kapitel 2

# Grundlagen der Physik von Sternatmosphären

In diesem Abschnitt werden nach der Einführung der grundlegenden Relationen zur Umrechnung stellarer Größen die wichtigsten physikalischen Grundlagen zur Behandlung von Sternatmosphären erklärt. Dabei werden grundlegende Methoden zur Lösung von Strahlungstransportproblemen beschrieben, die zur Modellierung der Atmosphären benötigt werden. Weiterhin wird die Hydrostatik und die Entstehung von Linienprofilen beschrieben. Soweit nicht anders erwähnt, basieren die meisten Herleitungen auf Mihalas (1970). Zum Abschluß dieses Abschnitts wird auf die Arbeitsweise von PHOENIX eingegangen.

#### 2.1 Grundlegende Relationen

Die Umrechnung der wichtigsten stellare Größen, wie Leuchtkraft L, Radius R, Masse M, Schwerebeschleunigung an der Oberfläche g und Effektivtemperatur  $T_{\text{eff}}$  erfolgt durch

$$L = 4\pi R^2 \sigma T_{\rm eff}^4 \tag{2.1}$$

und

$$g = \frac{GM}{R^2}.$$
(2.2)

Dabei ist G die Gravitationskonstante, die mit den in der Astrophysik üblichen cgs-Einheiten den Wert  $6.6726 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3/\text{gs}^2$  hat.  $\sigma$  ist die Boltzmann-Konstante mit  $\sigma = 5.6703 \cdot 10^{-5} \text{ erg}/(\text{s cm}^2 \text{ K}^4)$ . Die Effektivtemperatur wird in Gleichung 2.11 definiert. Üblicherweise wird die Schwerebeschleunigung an der Oberfläche in cgs-Einheiten logarithmisch angegeben, d.h. die Schwerebeschleunigung der Sonne ( $g = 2.736 \cdot 10^4 \text{ cm/s}^2$ ) wird beispielsweise als log g = 4.437 geschrieben. Die Umwandlung der Leuchtkraft in die bolometrische Helligkeit kann durch

$$M_{\rm bol} = 4.74 - 2.5 \log\left(\frac{L}{L_{\odot}}\right) \tag{2.3}$$

erfolgen, wobei  $L_{\odot} = 3.85 \cdot 10^{33} \text{erg/s}.$ 

Bei bekannten Werten für Sternmasse, -leuchtkraft und -radius relativ zu solaren Werten, der Größe g in cgs-Einheiten und  $T_{\text{eff}}$  in Kelvin, lassen sich die Umrechnungen folgendermaßen durchführen:

$$\frac{L}{L_{\odot}} = 2.459 \cdot 10^{-11} \frac{M}{M_{\odot}} \frac{T_{\rm eff}^4}{g}$$
(2.4)

und

$$g = 2.734 \cdot 10^4 \frac{M}{M_{\odot}} \left(\frac{R_{\odot}}{R}\right)^2.$$
 (2.5)

Die Bestimmung des Sternradius ist stark von dessen Definition abhängig. So kann ein Radius  $R_0$  beispielsweise durch die Atmosphärenschicht mit (frequenzabhängiger) optischer Tiefe  $\tau_{\nu} = 2/3$  definiert werden, also durch

$$\tau_{\nu}(R_0) = 2/3,$$

wie es hauptsächlich in der beobachtenden Astronomie üblich ist. Die folgende Definition wird meist in theoretischen Betrachungen benutzt. Dabei wird der Radius  $R_{\text{eff}}$  über die gegebene Masse M und der gegebenen Schwerebeschleunigung g definiert:

$$g(R_{\rm eff}) = \frac{GM}{R_{\rm eff}^2}$$

Eine Übersicht der verschiedenen Definitionen des Sternradius in der Literatur findet sich in Baschek *et al.* (1991).

#### 2.2 Energietransport

Sternatmosphären umfassen nach Definition die Schichten eines Sterns, aus denen Strahlung zu uns gelangt. Sie werden im Wesentlichen durch ihre Temperatur- und Druckverteilung sowie durch ihre chemische Zusammensetzung beschrieben. Zu deren physikalischer Behandlung werden zwei wichtige Grundmechanismen benötigt. Dabei handelt es sich zum einen um die hydrodydamischen bzw. hydrostatischen Eigenschaften, die hauptsächlich Einfluß auf die Druckverteilung der Atmosphäre haben. Zum anderen muß der Energietransport vom heißen Sterninneren in die kühlern Außenschichten beschrieben werden. Dieser kann im allgemeinen durch Strahlung, durch Konvektion oder Wärmeleitung erfolgen, wobei in Sternatmosphären Strahlungstransport und Konvektion dominieren.

#### 2.2.1 Strahlungstransport

#### Intensität

Zur Beschreibung des Strahlungsfeldes ist es zweckmäßig, den Energieaustritt aus einem infinitesimalen Flächenelement dA der Atmosphäre an einem Ort  $\vec{r}$  zu definieren. Dabei wird der zur Fläche gehörige Normalenvektor mit  $\vec{n}$ , die Austrittsrichtung mit  $\vec{l}$  und das Raumwinkelelement um die Austrittsrichtung mit  $d\Omega$  bezeichnet. Der Energieaustritt erfolgt in einem Zeitintervall [t, t + dt] und einem Frequenzbereich  $[\nu, \nu + d\nu]$ :

$$dE_{\nu} = I_{\nu}(\vec{r}, \vec{l}, t)(\vec{l} \cdot \vec{n}) \ dt \ d\nu \ dA \ d\Omega \tag{2.6}$$

Dabei wird  $I_{\nu}$  als *spezifische Intensität* bezeichnet. Die *mittlere Intensität*  $J_{\nu}$  wird durch Integration und Mittelung über alle Raumwinkel durch

$$J_{\nu}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi} \oint I_{\nu}(\vec{r},\vec{l},t) \, d\Omega$$
 (2.7)

definiert bzw. für den speziellen Fall der planparallelen Atmosphäre (Unabhängigkeit der Intensität vom azimutalen Winkel) und  $\mu = \cos \varphi$  durch

$$J_{\nu}(z,t) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} I_{\nu}(z,\mu,t) \, d\mu \tag{2.8}$$

gegeben.

#### Fluß

Der monochromatischer *Strahlungsfluß* (auch Strahlungsflußdichte oder Strahlungsstrom)  $\vec{F}_{\nu}$  kann durch die spezifische Intensität  $I_{\nu}$  ausgedrückt werden:

$$\vec{F}_{\nu}(\vec{r},\nu,t) = \oint I_{\nu}(\vec{r},\vec{l},\nu,t) \,\vec{l} \,d\Omega \tag{2.9}$$

Wird von einer planparallelen Atmosphäre ausgegangen, gilt  $\vec{l} \cdot d\vec{A} = \cos \varphi \cdot dA = \mu dA$ . Dabei ist  $\mu = \cos \varphi$  der Winkel zwischen der Flächennormalen  $(d\vec{A} = \vec{n} dA)$ , durch die die Strahlung tritt, und der Richtung des Strahls  $\vec{l}$ . Ist  $\vec{F} = (F_x, F_y, F_z)$ , so verschwinden bei entsprechender Wahl des Koordinatensystems die Komponenenten  $F_x$  und  $F_y$ . Der Fluß läßt sich dann als Skalar schreiben:

$$F_{\nu} = \oint I_{\nu} \,\mu \,d\mu \tag{2.10}$$

In der Literatur ist auch der astrophysikalische Fluß  $\pi \mathcal{F}_{\nu} = F_{\nu}$  zu finden.

#### Effektivtemperatur

Im Zusammenhang mit dem Strahlungsstrom kann die *Effektivtemperatur*  $T_{\text{eff}}$  definiert werden. Sie beschreibt den Gesamtfluß eines Schwarzen Körpers mit der Temperatur  $T_{\text{eff}}$  und per Definitionem den eines beliebigen Objekts, dessen Gesamtfluß mittels eines Schwarzen Körpers ausgedrückt wird:

$$\sigma T_{\text{eff}}^4 = \int_0^\infty B_\nu(T_{\text{eff}}) \, d\nu \tag{2.11}$$

$$\equiv \int_0^\infty F_\nu \, d\nu \tag{2.12}$$

Dabei ist  $\sigma$  die Stefan-Boltzmann Konstante. Die Planckfunktion in Frequenzdarstellung lautet

$$B_{\nu}(T) = \frac{2h\nu}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$
(2.13)

Dabei bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit, h die Planck- und k die Boltzmann-Konstante.

#### **Extinktion und Emission**

Die Strahlung kann innerhalb der Atmosphäre zu einem gewissen Anteil gestreut oder absorbiert werden. Entsprechend wird der Absorptions- und Streuungskoeffizient  $\kappa_{\nu}$  bzw.  $\sigma_{\nu}$  definiert. Beide können zum *Extinktionskoeffizienten* 

$$\chi_{\nu} = \kappa_{\nu} + \sigma_{\nu} \tag{2.14}$$

summiert werden, der als Opazität bezeichnet wird. Zur Vereinfachung wird die Opazität als isotrop angesehen, was im allgemeinen aber nicht der Fall ist. Proportional zu den Absorptions- oder Streuungskoeffizienten verringert sich die Intensität pro Weglänge dsum den Anteil dI (z.B. Rutten, 2002):

$$dI_{\nu} = -\kappa_{\nu} I_{\nu} ds$$
 Absorptionskoeffizient (2.15)

$$dI_{\nu} = -\sigma_{\nu} I_{\nu} ds$$
 Streuungskoeffizient (2.16)

Umgekehrt wird der Emissionskoeffizient  $\eta_{\nu}$  definiert, der angibt, wie sich die Intensität proportional zur Wegstrecke ds erhöht:

$$dI_{\nu} = \eta_{\nu} \, ds$$
 Emissionskoeffizient (2.17)

Die Absorption, Streuung und Emission von Strahlung wird durch atomare oder molekulare Übergänge, wie frei-frei-, gebunden-gebunden- und gebunden-frei-Übergänge oder durch Thompson- und Rayleighstreuung bestimmt.

#### Mittlere Opazitäten

Eine Atmosphäre wird als grau bezeichnet, wenn die Opazitäten nicht frequenzabhängig sind, also wenn  $\kappa_{\nu} = \kappa$ ,  $\chi_{\nu} = \chi$ , etc. gilt. Das ist bei Sternen nicht exakt der Fall, doch lassen sich heissere Sterne näherungsweise mit einer grauen Atmosphäre beschreiben. Als eine Abschätzung zur Behandlung der grauen Atmosphäre werden im folgenden gemittelte Opazitäten definiert.

Bei gegebener Temperatur T und bekanntem  $\kappa_{\nu}$  läßt sich das *Plancksche Mittel* (planck-mean)

$$\overline{\kappa}_b = \frac{\pi}{\sigma T^4} \int B_\nu \kappa_\nu d\nu \tag{2.18}$$

leicht berechnen. Eine mittlere Opazität, die die Menge an absorbierter Energie widerspiegelt, ist das *Absorptions-Mittel* (absorption-mean)

$$\overline{\kappa}_j = \frac{\int J_\nu \kappa_\nu d\nu}{\int J_\nu d\nu}.$$
(2.19)

Das  $flu\beta gewichtete Mittel (flux-weighted-mean)$ 

$$\overline{\chi}_f = \frac{\int F_\nu \chi_\nu d\nu}{\int F_\nu d\nu} \tag{2.20}$$

erhält bei der Anwendung in einer grauen Atmosphäre den Strahlungsdruck. Das Rosselandsche Mittel (rosseland-mean)

$$\frac{1}{\overline{\chi}_r} = \frac{\pi}{4\sigma T^3} \int \frac{1}{\chi_\nu} \frac{\partial B_\nu}{\partial T} d\nu$$
(2.21)



Abbildung 2.1: Weg der Strahlung durch eine infinitesimal dünne Schicht ds mit der Querschnittsfläche dA. Die Intensität  $I_{\nu}$  nach dem Durchlaufen von ds in der Zeit dt verändert sich um  $dI_{\nu}$ .

ist derart gewichtet, daß Opazitäten, die durch ein starkes Strahlungsfeld zustandekommen, am stärksten gewichtet werden.

#### **Optische Tiefe**

Nach der Definition der Opazität kann die optische Tiefe eingeführt werden, die durch

$$d\tau_{\nu} = \chi_{\nu} \, ds \qquad (2.22)$$
$$= -\chi_{\nu} \, \mu \, dz$$

definiert wird (Rutten, 2002).  $\mu dz$  steht für den speziellen Fall, daß der Strahl um den Winkel  $\mu = \cos \varphi$  von der Symmetrieachse z abweicht. Die optische Tiefe gibt in Verbindung mit der Strahlungstransportgleichung ein anschauliches Maß für die optische Dicke einer Atmosphäre an. So läßt sich der Intensitätsabfall durch Absorption und Streuung wie folgt darstellen:

$$dI_{\nu} = I_{\nu} d\tau_{\nu} \tag{2.23}$$

#### Strahlungstransportgleichung

Durchquert ein Lichtstrahl eine dünne Materieschicht, so erhöht sich der Energiebetrag des Strahls durch zusätzliche Emission aus der Schicht bzw. erniedrigt sich durch Absorption oder Streuung um den Beitrag dE. Das kann, wie in Abbildung 2.1 gezeigt, nach den Gleichungen 2.15–2.17 durch eine Änderung der spezifischen Intensität dI ausgedrückt werden:

$$dI_{\nu} \, ds \, d\nu \, d\Omega \, dA \, dt = \left(\eta_{\nu}(s) - \chi_{\nu}(s)I_{\nu}(s)\right) \, ds \, d\nu \, d\Omega \, dA \, dt \tag{2.24}$$

Die allgemeine Ableitung der Intensität nach der Wegstrecke lautet

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = \frac{\partial I_{\nu}}{\partial t} \frac{dt}{ds} + \frac{\partial I_{\nu}}{\partial s} \\
= \frac{1}{c} \frac{\partial I_{\nu}}{\partial t} + \frac{\partial I_{\nu}}{\partial s}$$
(2.25)

Wird in Kugelkoordinaten übergegangen<sup>1</sup> und wird ferner angenommen, daß die Intensität zeitunabhängig ist  $(\partial I_{\nu}/\partial t = 0)$  und der Stern keine azimutalen Intensitätsschwankungen hat  $(\partial I_{\nu}/\partial \varphi = 0)$ , d.h. sphärisch symmetrisch ist, so wird 2.25 zu:

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = \cos \vartheta \frac{\partial I_{\nu}}{\partial r} - \frac{\sin \vartheta}{r} \frac{\partial I_{\nu}}{\partial \vartheta} 
= \mu \frac{\partial I_{\nu}}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_{\nu}}{\partial \mu}$$
(2.26)

Aus Gleichung 2.24 folgt dann die Strahlungstransportgleichung:

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = \eta_{\nu}(s) - \chi_{\nu}(s)I_{\nu}(s)$$
(2.27)

Für Riesen-Sterne mit ausgedehnter Atmosphäre ist es günstig, in sphärischer Symmetrie zu rechnen. Andere stellare Objekte, z.B. Zwergsterne, lassen sich noch gut in planparalleler Näherung darstellen. Wird die Definition der optischen Tiefe und die Ergiebigkeit

$$S_{\nu} = \frac{\eta_{\nu}}{\chi_{\nu}} \tag{2.28}$$

benutzt (mittlerweile ist der Ausdruck Quellfunktion (source function) gebräuchlicher), so folgt aus der planparallelen Strahlungstransportgleichung die bekannte Form:

$$\mu \frac{dI_{\nu}}{d\tau_{\nu}} = I_{\nu} - S_{\nu} \tag{2.29}$$

Bei dieser Gleichung handelt es sich formal um eine Differentialgleichung erster Ordnung mit konstanten Koeffizienten, die den integrierenden Faktor  $e^{-\frac{1}{\mu}}$  besitzt. Somit ergibt sich

$$\frac{d}{d\tau} \left( I e^{-\frac{\tau}{\mu}} \right) = -\frac{1}{\mu} S e^{-\frac{\tau}{\mu}} \tag{2.30}$$

und als formale Lösung

$$I(\tau_1,\mu) = I(\tau_2,\mu) e^{-\frac{\tau_2-\tau_1}{\mu}} + \int_{\tau_1}^{\tau_2} S(t) e^{-\frac{t-\tau_1}{\mu}} \frac{dt}{\mu}.$$
 (2.31)

Dies ist die Intensität, wie sie für jeden Austrittswinkel  $\mu$  bestimmt wird. Problematisch für die Lösung dieser Integralgleichung ist die Tatsache, daß die Quellfunktion S bei der Berücksichtigung von Streuprozessen wiederum von I abhängt. Das legt einen iterativen Lösungsansatz nahe, der im nächsten Abschnitt besprochen wird. Unter der Annahme des wichtigen Spezialfalls einer optisch unendlich tiefen Atmosphäre ( $\lim \tau \to \infty$ ) ergibt sich jeweils ein Ausdruck der Intensität für die Ein- und Ausstrahlung bei einer optischen Tiefe  $\tau$  (Unsöld, 1955):

Ausstrahlung: 
$$I_{(\mu>0)}(\tau,\mu) = \int_{\tau}^{\infty} S(t)e^{\frac{t-\tau}{\mu}}\frac{dt}{\mu}$$
 (2.32)

Einstrahlung: 
$$I_{(\mu<0)}(\tau,\mu) = -\int_0^{\tau} S(t)e^{\frac{t-\tau}{\mu}}\frac{dt}{\mu}$$
 (2.33)

 $<sup>^{1}</sup>dr = \cos \vartheta ds, rd\vartheta = -\sin \vartheta ds$ 

Die Strahlungstransportgleichung für die gemittelte Intensität (mean intensity, siehe Gleichung 2.8) erhält man, indem über den Winkel  $\mu = \cos \varphi$  integriert wird:

$$J(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^1 \int_{\tau}^{\infty} S(t) e^{-\frac{t-\tau}{\mu}} dt \, d\mu - \frac{1}{2} \int_{-1}^0 \int_0^{\tau} S(t) e^{-\frac{\tau-t}{\mu}} dt \, d\mu$$
(2.34)

Durch Substitution und Umformung kann sie zur Schwarzschildgleichung

$$J(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^\infty S(t) E_1(|t - \tau|) dt$$
 (2.35)

mit dem exponentiellen Integral

$$E_n(x) \equiv \int_1^\infty \frac{e^{-xt} \, dt}{t^n}$$

umgeformt werden.

#### Lösung der Transportgleichung durch $\Lambda$ -Iteration

Im Folgenden soll skizziert werden, wie die Schwarzschildgleichung durch ein iteratives Verfahren gelöst werden kann.

$$J_{\nu}(\tau_{\nu}) = \frac{1}{2} \int_0^\infty S_{\nu}(t_{\nu}) E_1 | t_{\nu} - \tau_{\nu} | dt_{\nu} \qquad \text{Schwarzschildgleichung}$$
(2.36)

Da Gleichungen in dieser Form bei der Behandlung von Strahlungstransportproblemen oft auftreten, wird zu deren Abkürzung der  $\Lambda$ -Operator eingeführt:

$$\Lambda_{\tau}[f(t)] \equiv \frac{1}{2} \int_0^\infty f(t) E_1 |t - \tau| dt$$

Der Operator wird bei der Diskretisierung auch in Matrixschreibweise geschrieben, wie es beispielsweise in Mihalas (1970) genauer erläutert wird. Eine Quellfunktion mit lediglich einem Anteil an thermischer Emission im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) und einem mit isotroper kohärenter Streuung kann wie folgt geschrieben werden:

$$S_{\nu} = \frac{\kappa_{\nu}}{\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}} B_{\nu} + \frac{\sigma_{\nu}}{\kappa_{\nu} + \sigma_{\nu}} J_{\nu}$$
  
$$\equiv (1 - \rho_{\nu}) B_{\nu} + \rho_{\nu} J_{\nu} \qquad (2.37)$$

Hieran läßt sich erkennen, daß der Lösungsansatz in Gleichung 2.31 nur formaler Natur ist, da sie zu einer nichtlinearen Integro-Differentialgleichung geworden ist, die sich nicht analytisch lösen läßt. Wie bereits oben eingeführt, ist  $\kappa$  auch hier der Absorptions-,  $\sigma$  der Streuungskoeffizient und  $B_{\nu}$  die Planck–Funktion. Die durch den  $\Lambda$ -Operator formulierte Lösung, läßt sich einfach durch Einsetzen in Gleichung 2.35 hinschreiben:

$$J_{\nu}(\tau_{\nu}) = \Lambda_{\tau_{\nu}}[S_{\nu}(t_{\nu})] = \Lambda_{\tau_{\nu}}[B_{\nu}] + \Lambda_{\tau_{\nu}}[\rho_{\nu}(J_{\nu} - B_{\nu})]$$
(2.38)

Dies ist eine Integralgleichung, die durch Iteration gelöst werden kann. Im Fall von LTE wird  $J_{\nu} \to B_{\nu}$  für  $\tau_{\nu} \to \infty$ , so daß  $J_{\nu}^{(0)} = B_{\nu}$  als Iterationsstartwert gesetzt werden kann. Daraus folgt das Iterationsschema

$$J_{\tau_{\nu}}^{(i+1)} = \Lambda_{\tau_{\nu}}[S_{\nu}^{(i)}(t_{\nu})]$$
(2.39)

$$S_{\nu}^{(i+1)} = (1 - \rho_{\nu})B_{\nu} + \rho_{\nu}J_{\nu}^{(i+1)}.$$
(2.40)

#### Beschleunigte $\Lambda$ -Iteration

Ein großer Nachteil der  $\Lambda$ -Iteration ist deren überaus schlechtes Konvergenzverhalten in Bereichen von  $\tau > 1$  und  $\rho \to 1$  (Rutten, 2002). Für  $\tau > 1$  wird  $\Lambda[S] \approx S$ . Zwischen zwei Iterationsschritten  $S^{(i+1)}$  und  $S^{(i)}$  beträgt die Änderung

$$S^{(i+1)} - S^{(i)} = \rho \Lambda[S^{(i)}] - S^{(i)}$$
  

$$\approx \Lambda[S^{(i)}] - S^{(i)}$$
  

$$\approx 0$$
(2.41)

Das bedeutet, daß das klassische  $\Lambda$ -Iterationsverfahren bei der Berücksichtigung von Streuprozessen unbrauchbar ist. Eine deutliche Verbesserung des Konvergenzverhaltens läßt sich durch die Operator Splitting/Approximate Lambda-Iteration (OS/ALI) erreichen (Scharmer, 1981). Dabei wird der  $\Lambda$ -Operator folgendermaßen aufgespalten:

$$\Lambda_{\tau_{\nu}} = \Lambda^*_{\tau_{\nu}} + (\Lambda_{\tau_{\nu}} - \Lambda^*_{\tau_{\nu}}) \tag{2.42}$$

Damit läßt sich die Lösung ähnlich wie in Gleichung 2.38 formulieren:

$$J_{\nu}^{(i+1)}(\tau_{\nu}) = \Lambda_{\tau_{\nu}}^{*}[S_{\nu}^{(i+1)}] + \left(\Lambda_{\tau_{\nu}} - \Lambda_{\tau_{\nu}}^{*}\right)[S_{\nu}^{(i)}]$$
(2.43)

Es muß beachtet werden, daß  $\Lambda_{\tau_{\nu}}^{*}$  und  $\Lambda_{\tau_{\nu}} - \Lambda_{\tau_{\nu}}^{*}$  nicht auf die gleiche Quellfunktion Sangewendet werden, weil sich sonst wieder (2.38) mit dem entsprechendem Konvergenzverhalten ergibt. Explizit nach  $J_{\nu}^{(i+1)}$  aufgelöst folgt unter Vernachlässigung der Indizes:

$$J^{(i+1)} = [1 - \rho \Lambda^*]^{-1} \left( \Lambda S^{(i)} - \rho \Lambda^* J^{(i)} \right)$$
(2.44)

Die Schwierigkeit besteht in der Bestimmung eines geeigneten  $\Lambda^*$ , worauf hier nicht weiter eingegangen wird. Dies wird u.a. in Hauschildt und Baron (1999) beschrieben.

#### 2.2.2 Konvektion

Eine weitere Form des Energietransports in Sternatmosphären ist die Konvektion. Bei ihr handelt es sich um einen Energietransfer durch Massentransport. Unter der Annahme, daß die Atmosphäre aus einem idealen Gas besteht, läßt sich mit dem *Schwarzschild-Stabilitäts-Kriterium* prüfen, ob Konvektion auftritt:

$$\left(\frac{d\ln T}{d\ln p}\right)_R > \left(\frac{d\ln T}{d\ln p}\right)_A \tag{2.45}$$

Dabei ist  $d \ln T$  die logarithmische Temperatur- und  $d \ln p$  die logarithmische Druckänderung, jeweils für Strahlungs- (R) bzw. adiabatische Zustandsänderungen (A). Mit dem logarithmischen Temperaturgradienten  $\nabla = (d \ln T/d \ln p)$  läßt sich das Schwarzschild-Kriterium auch folgendermaßen schreiben:

$$\nabla_R > \nabla_A$$

Konvektion stellt sich also dort ein, wo der Temperaturgradient für den Strahlungstransport den adiabatischen übersteigt. Das kann durch eine hohe Opazität oder einen hohen Strahlungsfluß hervorgerufen werden.

#### 2.2. ENERGIETRANSPORT

Zur Behandlung des Transportproblems durch Konvektion wird eine Theorie benutzt, die die Konvektion näherungsweise behandelt, die sogenannte *Mischungsweg*-Theorie (MLT, mixing-length theory), die Biermann (1932) in die Astrophysik eingeführt hat. Demnach findet in konvektiven Schichten der Energietransport durch auf- und absteigende turbulente, adiabatische Elemente statt. Aufsteigende Elemente geben ihre thermische Energie erst nach dem Durchlaufen einer charakteristischen Weglänge, die als Mischungsweg (mixing-length) bezeichnet wird, an die Umgebung ab. Analog nehmen absteigende Elemente erst nach einem bestimmten Mischungsweg Energie aus dem umgebenden Medium auf. Beim Austausch der Energie gehen sie im umgebenden Medium auf. Dadurch, daß auf diese Weise Energie transportiert wird, verringert sich der Temperaturgradient, als wenn der Transport ausschließlich durch Strahlung erfolgt wäre. Bezeichnet man mit  $\nabla_R$  den radiativen Gradienten, mit  $\nabla$  den im Endzustand, wo Konvektion und Strahlung zusammenwirken, mit  $\nabla_E$  den Gradienten in individuellen konvektiven Masseelementen und mit  $\nabla_A$  den adiabatischen Gradienten, so muß gelten:

$$\nabla_R \ge \nabla \ge \nabla_E \ge \nabla_A \tag{2.46}$$

Mit der Einführung der Schwerebeschleunigung g, der Skalenhöhe des Drucks H als Abstand, bei dem sich der Druck um den Faktor e ändert

$$\frac{1}{H} = -\frac{d\ln p}{dr} = \frac{g\rho}{p},\tag{2.47}$$

der Wärmekapazität bei konstantem Druck  $C_p$  und  $Q = 1 - (\partial \ln \mu / \partial \ln T)_p$ , ergibt sich der durch Konvektion resultierende Fluß zu

$$F_{\rm conv} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{gHQ}{2}} (\rho C_p T) (\nabla - \nabla_E)^{3/2} \left(\frac{l}{H}\right)^2.$$
(2.48)

Dabei ist die Wahl des Mischungswegs l willkürlich und derzeit nur abschätzbar. Mit empirisch ermittelten Werten im Bereich von  $l/H \approx 1...2$  lassen sich die besten Ergebnisse erzielen.

#### 2.2.3 Temperaturkorrektur

Die Lösung der Strahlungstransportgleichung erfolgt unter der Annahme, daß die Temperaturstruktur der Atmosphäre bekannt ist. Es wird dann überprüft, ob der Gesamtfluß pro Schicht  $\tau$  der gewählten Effektivtemperatur entspricht:

$$\int_0^\infty F_{\tau,\nu} d\nu = \sigma T_{\text{eff}}^4 \tag{2.49}$$

Wenn dies nicht der Fall ist, besteht die Möglichkeit, Korrekturen u.a durch eine verallgemeinerte Unsöld-Lucy Methode durchzuführen (Hauschildt und Baron, 1999; Hauschildt *et al.*, 2003).

Dabei wird auf die zeitunabhängige, kugelsymmetrische Strahlungstransportgleichung

$$\mu \frac{\partial I_{\nu}}{\partial r} + \frac{1 - \mu^2}{r} \frac{\partial I_{\nu}}{\partial \mu} = \eta_{\nu} - \chi_{\nu} I_{\nu}$$

jeweils der Operator  $\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} d\mu$  und  $\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \mu d\mu$  angewandt und über alle Frequenzen integriert. Daraus folgen zwei Gleichungen, bei denen nach weiterer Umformung und Einführung der gemittelten Opazitäten in einer der beiden Gleichungen die Planckfunktion enthalten ist, die um einen Korrekturterm  $\Delta B$  erweitert wird. Unter der Ausnahme, daß sich die Verhältnisse  $\overline{\chi}_f/\overline{\kappa}_b$  und  $\overline{\kappa}_j/\overline{\kappa}_b$  (Gleichungen 2.18 – 2.21) bei einer Temperaturkorrektur nicht ändern, können die Gleichungen nach dem Korrekturterm  $\Delta B(\tau)$  aufgelöst werden, durch den dann mit

$$\Delta T(\tau) = \frac{\Delta B(\tau)}{4\sigma T(\tau)^3} \tag{2.50}$$

die Temperaturen in den Tiefenschichten  $\tau$  entspechend verändert wird.

#### 2.3 Atmosphärenaufbau

#### 2.3.1 Hydrostatik

16

Oft wird davon ausgegangen, daß in der Atmosphäre hydrostatisches Gleichgewicht vorliegt. Für Mira–Veränderliche gilt die Annahme der Hydrostatik aufgrund ihres Pulsationsmechanismusses nicht. Da die Pulsationen aber auf großen Zeitskalen im Bereich von 150 - 1000 Tagen erfolgen, kann dennoch von einer nur kleinen Abweichung der Hydrostatik ausgegangen und das Modell jeweils zu einem bestimmten Zeitpunkt (Phase) der Pulsation erstellt werden. Derzeit gibt es kein Modellierungsverfahren, das die Hydrodynamik *und* den Strahlungstransport berücksicht. Lediglich die Behandlung der grauen Atmosphäre ist in einigen Algorithmen implementiert, die die Hydrodynamik behandeln (Hoefner *et al.*, 1996). Im hydrostatischen Gleichgewicht gilt

$$\frac{dP}{dz} = -\rho g, \tag{2.51}$$

was in Einheiten der optischen Tiefe mit

$$\frac{dP}{d\tau} = \frac{dP_g}{d\tau} + \frac{dP_r}{d\tau} = \frac{g}{\overline{\chi}_{\nu}}$$
(2.52)

ausgedrückt werden kann. Dabei wurde berücksichtigt, daß sich der Gesamtdruck aus dem Gas- und dem Strahlungsdruck  $(P_g, P_r)$  zusammensetzt.  $\overline{\chi}_{\nu}$  bezeichnet das flußgewichtete Mittel:

$$\overline{\chi}_{\nu} = \frac{\int_0^\infty \chi_{\nu} F_{\nu} d\nu}{\int_0^\infty F_{\nu} d\nu}$$
(2.53)

Der Gradient des Strahlungsdrucks ist durch

$$\frac{dP_r}{d\tau} = \frac{1}{c} \frac{\int_0^\infty \chi_\nu F_\nu d\nu}{\overline{\chi}_\nu}$$
(2.54)

gegeben. Wenn der Strahlungsdruck zu hoch ist, wird der Gradient des Gesamtdrucks negativ und das hydrostatische Modell ist unbrauchbar. Der Gasdruck setzt sich aus den Partialdrücken der einzelnen Atome, Ionen, Elektronen und Moleküle zusammen:

$$P_{\text{gas}} = P_{\text{atoms}} + P_{\text{ions}} + P_{\text{elecs}} + P_{\text{molec}}$$
$$= (\rho_{\text{atoms}} + \rho_{\text{ions}} + \rho_{\text{elecs}} + \rho_{\text{molec}})kT$$
(2.55)

Dabei werden mit  $\rho$  die entsprechenden Dichten bezeichnet. Bei der Modellierung sind zunächst weder der Fluß, noch die Extinktionskoeffizienten bekannt. Als erste Abschätzung für  $dP_r/d\tau$  kann  $\sigma T_{\text{eff}}^4/c$  benutzt werden. Ist die Temperaturstruktur  $T(\tau)$  bekannt<sup>2</sup>, kann bei einer äusseren Schicht  $\tau_0 \ll 1$  (wo sich Drücke und Opazitäten berechnen lassen) begonnen und sukzessiv die Drücke der Schichten  $\tau_{i+1} = \tau_i + \Delta \tau$  über den Gradienten bestimmt werden.

#### 2.3.2 Die Zustandsgleichung

In Sternatmosphären ist die Wechselwirkung benachbarter Gasteilchen verglichen mit ihrer thermischen Energie sehr klein, weshalb das Gas in guter Näherung als ideales Gas behandelt werden kann. Erst bei Elektronenentartung kann die Näherung nicht mehr verwendet werden. Um die Teilchendichten und Ionisationszustände berechnen zu können, müssen die Zustandsgleichungen aufgestellt und gelöst werden.

#### Besetzungszahlen im LTE

Im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) ist die Verteilung der Teilchen in den gebundenen oder freien Zuständen ausschließlich von zwei thermodynamischen Größen wie Temperatur (T) und Dichte ( $\rho$ ) oder Temperatur und Gasdruck ( $P_{gas}$ ) abhängig. Die restlichen Größen können durch die ideale Gasgleichung bestimmt werden.

Wenn i und j zwei jeweils verschiedene Energieniveaus darstellen und  $\chi_i$  bzw.  $\chi_j$  deren dazugehörige Anregungsenergien aus dem Grundzustand sind, läßt sich das Verhältnis der Zahl der Atome im Zustand j zur Zahl der Atome im Zustand i bei gleicher Ionisationsstufe s durch die *Boltzmannformel* 

$$\frac{N_{i,s}}{N_{j,s}} = \frac{g_i}{g_j} e^{-(\chi_i - \chi_j)/kT}$$
(2.56)

ausdrücken. Die Faktoren  $g_i$ ,  $g_j$  sind die aus der Atomphysik bekannten statistischen Gewichte und ein Maß für die Entartung des Zustands. Die Zahl der Atome im Zustand irelativ zur Gesamtzahl der Atome gleicher Ionisationsstufe s kann mit Hilfe der inneren Zustandssumme

$$Q_s(T) = \sum_i g_i e^{\chi_i/kT} \tag{2.57}$$

berechnet werden. Mit ihr ergibt sich

$$\frac{N_{i,s}}{N_s} = \frac{g_i e^{-\chi_i/kT}}{Q_s(T)}.$$
(2.58)

Die innere Zustandssumme ist für einige Atomsorten in der Praxis schwierig zu bestimmen. Die Boltzmannformel gilt für gebundene Zustände, läßt sich aber leicht für Ionisation zur Saha-Gleichung erweitern. Bei einem Ionisationspotential  $\chi_{\rm I}$  erhält man das Verhältnis der Besetzungszahlen zwischen zwei beliebigen Ionisationsstufen:

$$\frac{N_{s+1}}{N_s} N_e = 2 \frac{Q_{s+1}}{Q_s} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{-\chi_{\rm I}/kT}$$
(2.59)

 $<sup>^2\</sup>mathrm{Ggf.}$ kann die Temperatur<br/>struktur in späteren Schritten durch die Temperaturkor<br/>rektur geändert werden.

#### Molekülbildung

Bei ausreichend niedrigen Temperaturen (ungefähr unterhalb von 4000 K) beginnt die Bildung von Molekülen in der Atmosphäre. Werden zweiatomige Moleküle AB bestehend aus den Atomen A und B betrachtet, kann die Gleichgewichtsreaktion  $A + B \rightleftharpoons AB$  stattfinden. Das Umwandlungsverhältnis wird durch das Massenwirkungsgesetz bestimmt:

$$\frac{P(A) P(B)}{P(AB)} = K_{AB}(T) \tag{2.60}$$

K(T) ist die Gleichgewichtskonstante, die sich ähnlich wie die Saha-Gleichung herleiten läßt:

$$K_{AB}(T) = \left(\frac{2\pi\mu kT}{h^2}\right)^{3/2} kT \frac{Q_A Q_B}{Q_{AB}} e^{-D/kT}$$
(2.61)

Dabei ist  $\mu = m_A m_B / m_{AB}$  die reduzierte Molekülmasse und D die Dissoziationsenergie.

#### 2.4 Linienprofile

Die Koeffizienten für gebundene Zustände sind proportional zur *Profilfunktion*  $\varphi(\nu)$  einer Linie. Die Profilfunktion ist auf eins normiert:

$$\int_0^\infty \varphi(\nu) \, d\nu = 1 \tag{2.62}$$

Bei der Emission gilt für einen Übergang  $j \rightarrow i$ 

$$\eta_{\nu,j\to i} = \frac{h\nu}{4\pi} A_{ji} n_j \varphi_\eta(\nu) \tag{2.63}$$

und für die Absorption, also dem Übergang von  $i \to j$ , gilt

$$\kappa_{\nu,j\to i} = \frac{h\nu}{4\pi} B_{ij} n_i \varphi_\kappa(\nu). \tag{2.64}$$

Dabei sind  $A_{ji}$  und  $B_{ij}$  die Einsteinkoeffizienten der entsprechenden Übergänge und  $n_i$  und  $n_j$  die Besetzungszahlen im Zustand *i* bzw. *j*. Die Profilfunktionen  $\varphi_{\eta}$  und  $\varphi_{\kappa}$  sind im allgemeinen verschieden, können aber für den Grenzfall langer Lebensdauern der Niveaus als gleich angesehen werden. Es wird in diesem Zusammenhang von *vollständiger Frequenzumverteilung der Linienphotonen* (complete redistribution, CRD) gesprochen (Mihalas, 1970). Die Linienbreite und somit die Profilfunktion ist im wesentlichen durch die Temperatur und den Druck bestimmt. Im Vergleich dazu ist die natürliche Linienbreite, die durch die mittlere Lebensdauer eines ungestörten Zustands bestimmt wird, vernachlässigbar klein. Die Lebensdauer kann beispielsweise durch Stöße von außen oder durch Strahlung innerhalb des Atoms verringert werden. Es ergibt sich die *Lorentzverteilung* 

$$L(\nu - \nu_0) = \frac{\gamma}{2\pi(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$
(2.65)

mit  $\gamma = \gamma_{\text{Str}} + \gamma_{\text{Stoß}}$  als Stoßparameter. Die *Strahlungsdämpfungs*konstante  $\gamma_{\text{Str}}$  ist die Summe der reziproken Lebensdauern beider Energieniveaus *i* und *j*. Die *Stoßdämpfungs*konstante entspricht der doppelten Anzahl wirksamer Stöße pro Zeiteinheit.

Durch die vorherrschende Temperatur und evtl. vorhandenen Turbulenzen bewegen sich die Atome (und Moleküle) entsprechend der Maxwell–Boltzmann–Geschwindigkeitsverteilung, was zu einem Dopplereffekt führt, der berücksichtigt werden muß. Mit der Dopplerbreite

$$\frac{\nu_D - \nu_0}{\nu_0} = \frac{\Delta \nu_D}{\nu_0} = \frac{v_0}{c}$$
(2.66)

als Maß für die Geschwindigkeit des absorbierenden Atoms ergibt sich das *Dopplerprofil* (Gaußprofil)

$$D(\nu - \nu_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(\nu_D - \nu_0)} e^{-\left(\frac{\nu - \nu_0}{\nu_D - \nu_0}\right)^2}.$$
(2.67)

Das Gesamtprofil als Faltung von Doppler- und Lorentzfunktion wird als *Voigtprofil* bezeichnet (s. Abbildung 2.2):

$$H(\nu - \nu_0) = L(\nu - \nu_0) * D(\nu - \nu_0)$$
(2.68)

Bei der Modellierung vieler Linienprofile ist es für die numerische Berechnung aus Ge-



Abbildung 2.2: Das Gesamtlinienprofil (Voigtprofil) gefaltet aus einem Dopplerkern (~  $e^{-(\nu/\nu_D)^2}$ ) und einem Dämpfungsflügel (~  $1/\nu^2$ ).

schwindigkeitsgründen ratsam, anhand der Größen Temperatur und Druck zu entscheiden, ob ein Voigt- oder ein einfaches Dopplerprofil berechnet werden soll.

#### 2.5 Nichtlokales thermodynamisches Gleichgewicht (NLTE)

Vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) kann gesprochen werden, wenn die Besetzungs- oder Ionisierungszahlen vollständig durch die Stefan–Boltzmann–Gleichung anhand der thermodynamischen Größen Temperatur und Dichte oder Temperatur und Druck beschrieben werden können. Bei einem starken, nicht–planckschen Strahlungsfeld, wenn die Strahlungsübergänge gegenüber den Stofübergängen dominieren, kann nicht mehr von einem thermodynamischen, sondern allenfalls von einem kinetischen oder statistischen Gleichgewicht gesprochen werden. Das hat zur Folge, daß sich die Besetzungszahlen der Zustände nicht mehr durch die Saha-Boltzmann-Gleichungen ermitteln lassen. Ist diesem Fall wird dann vom NLTE gesprochen. Die Definition der Temperatur ist dann nur noch im Sinne einer kinetischen Temperatur möglich, weil die Maxwellsche Geschwindigkeitsverteilung weiterhin gültig ist. Werden Übergänge  $i \rightarrow j$  betrachtet, so ist die Veränderung der Zahl der Teilchen im Zustand  $N_i$  von der Reaktionsrate pro Zeiteinheit  $P_{ij} = P_{i\rightarrow j}$  abhängig:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{i \neq j} N_j P_{ji} - N_i \sum_{i \neq j} P_{ij}$$
(2.69)

Die Reaktionsrate besteht je aus einem Anteil an Strahlungs- und Stoßübergängen, also  $P_{ij} = R_{ij} + C_{ij}$ . Dabei sind  $C_{ij}$  und  $C_{ji}$  die Koeffizienten der Stoßraten, die über die Relation

$$\frac{C_{ij}}{C_{ji}} = \frac{g_j}{g_i} e^{\frac{E_{ij}}{kT}}$$
(2.70)

zusammenhängen.  $E_{ij}$  ist die Energiedifferenz zwischen den Niveaus *i* und *j*. Der Nettoüberschuß der Übergänge wird mit

$$\mathcal{R}_{ij} = N_i R_{ij} - N_j R_{ji} \tag{2.71}$$

und

$$\mathcal{C}_{ij} = N_i C_{ij} - N_j C_{ji} \tag{2.72}$$

abgekürzt. Im stationären Zustand, einer Annahme, die bereits bei der Aufstellung der Strahlungstransportgleichung gemacht wird, ändert sich die Zahl der Teilchen pro Zustand nicht, d.h. es gilt  $dN_i/dt = 0$ . Dementsprechend gilt die *Ratengleichung* 

$$\sum_{i \neq j} \mathcal{R}_{ij} + \sum_{i \neq j} \mathcal{C}_{ij} = 0, \qquad (2.73)$$

wobei das Kontinuum ebenfalls als diskreter Zustand betrachtet wird. Sinnvoll ist die Einführung der Abweichungskoeffizienten (sog. *departure coefficients*)  $b_i$ , die angeben, in welchen Maße sich die Besetzungszahlen im NLTE von denen im LTE unterscheiden:

$$b_i = \frac{N_i(T, N_e, J_\nu)}{N_i^*(T, N_e)}$$
(2.74)

Es sind  $N_i^*(T, N_e)$  die Besetzungszahlen, wie sie in Abhängigkeit von der Temperatur T und der Elektronendichte  $N_e$  mit der Saha-Boltzmann-Gleichung berechnet wurden, wobei jedoch die Werte für die Elektronen- und Ionendichten aus NLTE-Rechnungen resultieren. Ohne weitere Herleitung ergibt sich

$$\mathcal{R}_{ij} = N_i^* \left[ B_{ij} \left( b_i - b_j e^{-h\nu_{ij}/kT} \right) \int \varphi_{\nu} J_{\nu} d\nu - b_j B_{ij} \left( 1 - e^{-h\nu_{ij}/kT} \right) B_{\nu} \right].$$
(2.75)

 $B_{ij}$  sind die Einsteinkoeffizienten,  $B_{\nu}$  ist die Planckfunktion,  $\varphi_{\nu}$  das Linienprofil und  $J_{\nu}$  die mittlere Intensität. Aus Gleichung 2.75 wird ersichtlich, daß (ganz im Gegensatz zum LTE), die Besetzungszahlen abhängig vom Strahlungsfeld sind. Die Ratengleichungen können ähnlich wie das Problem der Strahlungstransportgleichung durch das OS/ALI-Verfahren gelöst werden. Die gesuchten Werte sind die  $N_i$ 's oder äquivalent die  $b_i$ 's.

#### 2.6 Atmosphärenmodellierung mit PHOENIX

PHOENIX ist ein Programmpaket zur Atmosphärenmodellierung und Spektrensynthese von Sternen und (jovianischen) Planeten und ist für alle aktuellen leistungsfähigen Betriebssysteme erhältlich<sup>3</sup>. Dabei werden die Methoden benutzt, wie sie in den vorhergehenden Abschnitten vereinfacht behandelt wurden. Zusätzlich löst PHOENIX das Problem expandierender Hüllen und kann somit Novae und Supernovae modellieren. Zu diesem Zweck wurde die Strahlungstransportgleichung für den relativistischen Fall aufgestellt und mit der Approximierten Lambda-Iterationsmethode OS/ALI für den relativistischen Fall gelöst. Weiterhin wird das Problem der Überdeckung mehrerer Linien verschiedener Spezies (Elemente + Moleküle) im gleichen Spektralbereich (line blending) berücksichtigt. Für die Berechnungen der einzelnen Linien wird auf Datensätze zurückgegriffen, die ca. 42 Millionen Atom- und 700 Millionen Moleküllinien enthalten.

Die spektrale Auflösung ist im Prinzip beliebig einstellbar, wobei die Rechenzeit linear mit der Anzahl der Wellenpunkte ansteigt. Zur Reduzierung der Rechenzeit wurde das Programm hochgradig parallelisiert. Die Berechnung kann dadurch effektiver erfolgen, da ein Prozessor dadurch nicht lange auf die Ergebnisse eines anderen warten muß oder die einzelnen Prozessoren vollständig unabhängig voneinander rechnen können, sofern das Problem entkoppelbar ist. PHOENIX nimmt für seine Rechnungen wahlweise LTE oder NLTE an; letzteres ist für rund 40 Elemente und für das relativ einfach behandelbare CO–Molekül möglich.

Für den Bereich der kühlen Riesen, die das Thema dieser Arbeit sind, macht das Programm die Annahmen, daß Kugelsymmetrie, Zeitunabhängigkeit ( $\partial I/\partial t = 0$ ) und Energieerhaltung im Strahlungsgleichgewicht vorliegen. Bis auf einige Ausnahmen, in denen explizit im NLTE gerechnet wird, wird vom lokalem thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) ausgegangen.

#### Ablaufplan

Es übersteigt den Rahmen dieser Arbeit, auf die einzelnen Algorithmen von PHOENIX einzugehen. Diese sind beispielsweise in Hauschildt *et al.* (1997), Baron und Hauschildt (1998) und Hauschildt und Baron (1999) beschrieben. In Abbildung 2.3 ist ein grober Ablaufplan von PHOENIX dargestellt.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Es werden derzeit die Betriebssysteme AIX, HPUX, SGI, Unicos, OSF1, Linux, Mac OS X und FreeBSD unterstützt.



9.fertiges Modell & Spektrum

- Es wird ein Modell aus einem vorherigem Lauf als Eingabe verwendet. In den Modelldaten ist u.a. die Temperatur-, Druckund Dichtestruktur gespeichert, wobei die gegebene Temperaturstruktur wichtig zur Berechnung der Hydrostatik ist. Ggf. kann die Berechnung eines neuen Modells ohne ein Eingabemodell gestartet werden.
- 2. Je nach Parametrisierung wird die neue Druck- und Dichtestruktur durch die Hydrostatik und die Zustandsgleichung (im LTE) berechnet oder aus einer Vorgabe übernommen.
- 3. Hier findet die Selektion von Atom- und Moleküllinien aus der Datenbank statt. Je nach Vorgabe wird nur ein Bruchteil der 42 bzw. 700 Millionen Atom- bzw. Moleküllinien gelesen.
- 4. Die Berechnung der Opazitäten findet für alle Wellenlängenpunkte anhand der Temperatur- und Dichtestruktur statt.
- 5. Ebenfalls für alle Wellenlängen wird mit den Opazitäten das Problem des Strahlungstransports gelöst.
- 6. Die Berechnung des Flusses an dieser Stelle ist ohne großen Aufwand möglich, da alle benötigten Werte in vorhergehenden Schritten ermittelt wurden.
- 7. Es wird überprüft, ob die Energieerhaltung gegeben ist.
- 8. Falls nicht, findet eine Temperaturkorrektur in den einzelnen Schichten statt und das Programm beginnt eine weitere Iteration.
- 9. Ist die gewünschte Anzahl von Iterationen erreicht oder die Temperaturkorrekturen liegen unterhalb eines einstellbaren Minimalwertes, wird das Programm beendet und das Modell und Spektrum ausgegeben.

Abbildung 2.3: Ablaufplan von PHOENIX

### Kapitel 3

### Modellrechnungen mit PHOENIX

In diesem Kapitel wird die Erstellung und Analyse der Modelle beschrieben. In Abschnitt 3.1 wird dargestellt, welche Leuchtkräfte und Effektivtemperaturen die Modelle haben, die dann in ein Hertzsprung–Russell–Diagramm eingetragen werden. Die Leuchtkräfte und Temperaturen werden mit denen von 165 Mira–Veränderlichen, einer Auswahl von Sternen aus dem HIPPARCOS–Katalog und fünf theoretischen Entwicklungswegen verglichen.

Es wurden 1040 Modelle gerechnet, wobei einige Kombinationen von Modellparametern bei der Berechnung keine stabilen Modelle ergaben. Welche Parameter zu den Instabilitäten führen ist in Abschnitt 3.2 beschrieben.

Einige Moleküle haben einen großen Einfluß auf die Opazität, wie z.B. TiO, VO und H<sub>2</sub>O. Ihr Vorkommen ist stark vom Verhältnis von Kohlenstoff zu Sauerstoff (C/O) abhängig, weil sich praktisch alle Kohlenstoff- und Sauerstoffatome zuerst im Kohlenmonoxid (CO) binden, das eine hohe Dissoziationsenergie hat. Nur der überschüssige Kohlenstoff, bzw. Sauerstoff steht dann zur Bildung anderer Moleküle zur Verfügung. In Abschnitt 3.3 wird beschrieben, wie Modelle mit unterschiedlichen Häufigkeiten von C und O berechnet werden und der Einfluß der verschiedenen Häufigkeiten auf die Spektren untersucht wird.

Bei der Analyse der Modelle fiel auf, daß einige Spektren von Modellen mit hohen Temperaturen und niedriger Schwerebeschleunigung eine untere Einhüllende in Form einer Planck-Kurve besitzen. Das ist kein physikalischer, sondern ein durch die Modellierung hervorgerufener Effekt, der in Abschnitt 3.4 untersucht wird. Es wird beschrieben, unter welchen Bedingungen dieser Effekt auftritt und wie er ohne Betrachtung des Spektrums anhand von Modellgrößen detektiert werden kann.

Um zu prüfen, inwieweit die Annahme des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts (LTE) in den vorhergehenden Modellen gerechtfertigt ist, sind für eine Reihe von Elementen NLTE-Rechnungen durchgeführt worden (Abschnitt 3.5). Dabei wurden die Abweichungskoeffizienten  $b_i$  für die Elemente H, He, Li, C, N, O, Na, Mg, Si und Ti berechnet. Als Vereinfachung wurden nur neutrale Elemente berücksichtigt und für höhere Ionisationsstufen wurde LTE angenommen.

#### 3.1 Parameterbereiche und Einordnung in ein Hertzsprung–Russell–Diagramm

Der Zusammenhang zwischen den Modellparametern Effektivtemperatur  $T_{\rm eff}$ , Radius R, Leuchtkraft L, Masse M und Schwerebeschleunigung g ist bei der Benutzung von cgs-Einheiten durch Gleichung 2.4 und Gleichung 2.5 gegeben. Somit ist es ausreichend, wenn man von den fünf nur drei Parameter festlegt. In diesem Fall wurde die Effektivtemperatur, die Masse und die Schwerebeschleunigung an der Oberfläche festgelegt.

Es sind Modelle für einen Temperaturbereich von  $T_{\text{eff}} = 2000...4500 \text{ K}$  bei einer Schrittweite von  $\Delta T_{\text{eff}} = 100 \text{ K}$  berechnet worden. Der Bereich der Schwerebeschleunigung erstreckt sich in Abständen mit  $\Delta \log g = 0.5$  von  $\log g = -1.0$  bis 2.5. Mira–Veränderliche haben zu Beginn ihrer Entwicklung ungefähr zwischen 0.6 bis 3.0 Sonnenmassen, wobei für die Berechnungen angenommen wurde, daß deren Masse eine Sonnenmasse beträgt. Der Unterschied von Modellen mit 0.5, 1.0 und 5.0  $M_{\odot}$  wird im Anhang (B.1) kurz dargestellt.

Die Modellatmosphären sind aus 50 Schichten aufgebaut, die aufgrund der geringen Schwerebeschleunigung nicht planparallel sondern sphärisch angeordnet sind, d.h. die Strahlungstransportgleichung wird in sphärischer Symmetrie gelöst.

In den meisten Modellen ist das Gitter für die optische Tiefe so eingestellt, daß die unterste Schicht eine optische Dicke von  $\tau_i = 10^2$  und die oberste eine von  $\tau_o = 10^{-6}$  hat. Das Gitter für die optische Tiefe ist in allen Modellen bei einer Wellenlänge von  $\lambda = 1.20 \,\mu$ m definiert worden.

Die Elementhäufigkeiten entsprechen bis auf die Kohlenstoff- und Sauerstoffhäufigkeiten den solaren Häufigkeiten. Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben wird, wurden diese so eingestellt, daß ein C/O–Verhältnis von 0.4, 0.48 (solar), 0.8, 1.0 und 1.2 erreicht wird. Somit wurden insgesamt 1040 Modelle berechnet.

Zusätzlich ist bei allen mit PHOENIX durchgeführten Modellrechnungen die Staubbildung aktiviert worden. Es wurde mit dem sogenannten "dusty"–Staubmodell gerechnet. Bei "dusty"–Rechnungen wird in den Atmosphärenschichten die Staubbildung berücksichtigt, der in den Schichten, in denen er gebildet wurde, verbleibt und zur Opazität beiträgt. Das Modell stellt *einen* Grenzfall in der Behandlung von Staub dar. Ein anderer Grenzfall wird durch das "cond"–Staubmodell berücksichtigt, bei dem zwar die Bildung von Staub stattfinden kann, der jedoch aus der Atmosphäre in tieferen Schichten verschwindet (ausregnet) und nicht zur Opazität beiträgt. Durch die Staubentstehung erhöht sich in einigen Bereichen der Atmosphäre der Stahlungsdruck, so daß sich aufgrund veränderter Hydrostatik die Atmosphärenstruktur verändern kann.

Wie in den Abbildungen 3.1 und 3.2 zu sehen ist, wurde der gewählte Parameterbereich für die Modelle in ein Hertzsprung–Russell–Diagramm (HRD) eingetragen. Dieser ist dann mit Daten aus zwei Sternkatalogen verglichen worden. Zum einen wurden Daten eines Mira–Katalogs (Alvarez und Mennessier, 1997) benutzt, um darzustellen, in welchem Bereich Mira–Veränderliche im HRD zu finden sind. Desweiteren wurde ein Katalog benutzt, der aus über 17000 Objekten besteht, die weniger als 100 pc von der Sonne entfernt sind (Allende Prieto und Lambert, 1999). Sie wurden mit dem HIPPARCOS–Satelliten aufgenommen. Zusätzlich wurden zur Orientierung theoretische Entwicklungswege von Sternen mit Anfangsmassen von  $M_{\odot} = 0.6, 0.8, 1.0, 2.0$  und 5.0 und einer chemischen Zusam-



Abbildung 3.1: Theoretisches Hertzsprung–Russell–Diagramm. Eingetragen sind die gerechneten Modelle (+) und Objekte aus dem im Text beschriebenen Mira- (\*) und HIPPARCOS–Katalog  $(\cdot)$ , sowie fünf theoretisch berechnete Entwicklungswege.

mensetzung von Y = 0.250 und Z = 0.008 eingezeichnet<sup>1</sup> (Baraffe *et al.*, 1995). Dabei ist nur der Entwicklungsweg nach Verlassen der Hauptreihe bis kurz vor dem Helium–Flash berücksichtigt.

#### 3.1.1 Stellare Größen aus dem Mira–Katalog

Im Mira-Katalog (Alvarez und Mennessier, 1997) sind fundamentale stellare Größen zu 165 Mira–Veränderlichen verzeichnet, in diesem Fall die Effektivtemperatur und bolometrische Helligkeit. Die Größen wurden von Alvarez und Mennessier (1997) wie folgt ermittelt:

Ausgehend von Beobachtungen mit schmalbandigen Filtern, bei denen annähernd 300 Mira–Veränderliche in einem Zeitraum von über zwei Jahren beobachtet wurden (Lockwood, 1972), sind Indizes relativ zum Pseudo–Kontinuum der Titaniumoxid(TiO)- und Vanadiumoxid(VO)–Banden bestimmt worden. Diese Indizes können als Temperaturindi-

 $<sup>^1{\</sup>rm Y}$  bezeichnet den Massenanteil von Helium und Z<br/> den Massenanteil aller anderen Elemente außer Waserstoff.



Abbildung 3.2: Theoretisches Hertzsprung–Russell–Diagramm für den Bereich des Mira– Kataloges. Eingetragen sind die gerechneten Modelle (+) und die Mira–Veränderlichen aus dem Katalog (\*). Die waagerechten Linien stellen den Variationsbereich der Effektivtemperatur aufgrund der Pulsation dar. Für die beiden markierten Objekte R Leo und R CVn existieren phasenaufgelöste Spektren. Sie werden im nächsten Kapitel betrachtet.

katoren dienen. Bei den beobachteten Sternen handelt es sich um Mira–Veränderliche mit einem Kohlenstoff–Sauerstoff–Verhältnis zwischen 0.95 und 1.01, d.h. Mira–Veränderliche der Typen M und S (Zur Einteilung der Typen siehe Abschnitt 1.1.2).

Die benutzten Filter und der dazugehörige Spektralbereich sind in Tabelle 3.1 aufgelistet.

Die Indizes 78–88 und 105–104 wurden durch synthetische Spektren, wie sie ein Atmosphärencode von Plez erzeugt hat (Plez *et al.*, 1992; Plez, 1992), auf die Effektivtemperatur geeicht. Auf diese Art und Weise ergibt sich durch Auftragen der Indizes 78–88 gegen die Indizes 105–104 eine Sequenz von Effektivtemperaturen (Abbildung 3.3). Die beobachteten und berücksichtigten Mira–Veränderlichen wurden wurden zwischen drei- und fünfmal aufgenommen, so daß durch einen Fit an

$$F_{\text{index}} = a_0 + a_1 \sin[2\pi(\varphi - a_2)]$$

eine Abschätzung der Indizes  $F_{index}$  im Helligkeitsminimum und -maximum bei gegebener Periodenphase  $\varphi$  durchgeführt werden konnte. Die gemessenen Punkte auf der

Filter-	Wellenlänge	Bandbreite bei	Beschreibung
bez.	des Maximums	halber Intensität	
78	7818 Å	90 Å	2-3 und 3-4 Banden
			des TiO- $\gamma$ -Systems
87	8777 Å	82 Å	Pseudokontinuum
88	8884 Å	114 Å	0-0 Banden des
			${ m TiO-}\delta - { m Systems}$
104	10351 Å	125 Å	Kontinuum
105	$10506~{\rm \AA}$	100 Å	$\Delta v = 0$ Übergang
			des VO A-X Systems

Tabelle 3.1: Benutzte Filter zur Berechnung der Indizes. Eine Erläuterung der Nomenklatur für TiO–Übergänge findet sich im Anhang. (Aus Alvarez und Mennessier (1997))



Abbildung 3.3: Kalibration der Filterindizes (78–88,105–104) mit den Effektivtemperaturen. Sie erfolgte mit synthetischen Spektren, erzeugt in Plez *et al.* (1992). Die Abbildung entstammt Alvarez und Mennessier (1997).

(78–88,105–104)–Ebene liegen teilweise weit von der Temperatursequenz entfernt. Der Punkt auf der Sequenz, der dem Meßwert am nächsten kam, wurde als ermittelte Temperatur, der Abstand zwischen Meßwert und Temperatursequenz als Maß für die Unsicherheit angesehen. Als Durchschnittstemperatur wurde dann  $T_{\rm avg} = 1/3 T_{\rm max} + 2/3 T_{\rm min}$  genommen, als Amplitude  $T_{\rm max} - T_{\rm min}$ .

Kritisch bei dem Verfahren ist hauptsächlich die Kalibration durch die synthetischen Spektren. Auch die große Streuung der Meßwerte von der Temperatursequenz sollte kritisch betrachtet werden.



Abbildung 3.4: Zusammenhang zwischen Effektivtemperatur und Pulsationsperiode für 165 Mira–Veränderliche. Die Periode ist logarithmisch in Tagen angegeben. Die Abbildung stammt aus Alvarez und Mennessier (1997).

Die bolometrische Helligkeit, die für die Darstellung im HRD durch

$$\log \frac{L}{L_{\odot}} = \frac{4.74 - M_{\rm bol}}{2.5}$$

in Sonnenleuchtkräfte umgerechnet wurde, konnte aus Evolutions- und Pulsationsrechnungen bestimmt werden. Diese wurden u.a. von Lattanzio (1991), Vassiliadis und Wood (1993), Fox und Wood (1982) und Barthes und Tuchman (1994) durchgeführt.

Dabei wurden die ermittelten Temperaturen mit der Periode in Beziehung gesetzt. Bei Angabe der Effektivtemperatur in Kelvin und der Periode P in Tagen wurde durch Regression mit einer Geraden die Beziehung

$$\log T_{\rm fit} = 3.888 - 0.174 \log P \tag{3.1}$$

gefunden. Die Streuung der Einzelwerte von der Regressionsgeraden ist in Abbildung 3.4 zu sehen. Unter der Annahme solarer Häufigkeiten kann nach Bessell *et al.* (1996) für Mira–Veränderliche die Relation

$$M_{\rm bol} = \frac{\log T_{\rm eff} - 3.697 - 0.091 \log M}{0.0631 - 0.025 \log M}$$

angenommen werden. Dabei ist  $M_{\text{bol}}$  die bolometrische Helligkeit und M die Masse. Letztere ergibt sich nach Alvarez und Mennessier (1997) aus

$$M = (M_{\min} - M_{\text{mean}}) \frac{T_{\text{eff}} - T_{\text{fit}}}{(T_{\text{eff}} - T_{\text{fit}})_{\min}} + M_{\text{mean}}.$$

Objekt	$T_{\rm eff}/{\rm K}$	$T_{\rm amp}/{\rm K}$	$T_{\rm err}/{\rm K}$	$L/L_{\odot}$
R CVn	2810	640	60	2606
R Leo	2740	410	50	2376

Tabelle 3.2: Die stellaren Größen für R CVn und R Leo laut Mira–Katalog (Alvarez und Mennessier, 1997)

 $T_{\rm eff}$  ist die Effektivtemperatur, wie sie durch die Farbindizes (s.o.) ermittelt wurde und  $T_{\rm fit}$  die Temperatur, die aus der Periode hergeleitet wurde (Gleichung 3.1).  $M_{\rm min}$  und  $M_{\rm mean}$  wurden mit  $0.8M_{\odot}$ , bzw.  $1.7M_{\odot}$  angesetzt. Für den Bereich log P = [2.0, 2.6] ergibt sich so die PL-Relation

$$M_{\rm bol} = 3.15 - 3.12 \log P.$$

In dem Katalog sind zwei Objekte (R Leo und R CVn) enthalten, für die Spektren vorhanden sind. Ihre Effektivtemperaturen und Leuchtkräfte laut Katalog sind in Tabelle 3.2 aufgeführt. Mit den Spektren und berechneten Modellen soll, wie in Kapitel 4 beschrieben wird, versucht werden,  $T_{\rm eff}$ , log g und C/O zu bestimmen.

Abschließend läßt sich sagen, daß die stellaren Größen, wie sie im Katalog angegeben sind, als grobe Richtwerte anzusehen sind. Letztendlich dienen die Katalogdaten nur zur groben Orientierung im HRD und als Vergleich mit den berechneten Modellen.

#### 3.1.2 Stellare Größen benachbarter Sterne aus dem HIPPARCOS– Katalog

Allende Prieto und Lambert (1999) haben alle Sterne ausgewählt, die innerhalb eines Radius von 100 pc im HIPPARCOS–Katalog (Perryman und ESA, 1997) mitsamt den beobachtbaren Daten, wie B-V und  $M_v$  verzeichnet sind. Die Gesamtzahl der Sterne beläuft sich auf 17 219, von denen die meisten noch auf der Hauptreihe liegen. Die dazugehörigen stellaren Größen wurden durch Berechnung von Evolutionspfaden und der Abbildung von den beobachtbaren Größen B-V und  $M_v$  auf die physikalische  $T_{\rm eff}$ –log g–Ebene ermittelt. Dafür wurden Evolutionspfade von Bertelli et al. (1994) benutzt. Ausgehend von einer Ausgangsmasse und der chemischen Zusammensetzung des Sterns ist dort in Abhängigkeit von der Zeit u.a. die Entwicklung von den Effektivtemperaturen und den Radien berechnet worden.

Laut Allende Prieto und Lambert (1999) ist die Radienbestimmung mit 6%, die Temperaturbestimmung mit 2% und die Massenbestimmung mit 8% Genauigkeit durchgeführt worden.

Die Größen der ca. 17000 Sterne, die in die Katalog aufgenommen wurden, liegen in folgenden Bereichen:

#### 3.1.3 Bedeutung des gewählten Bereiches für die Modellrechnungen

Wird die Lage der Mira–Variablen und des berechneten Modelgrids in Abb. 3.1 betrachtet, so ist zu erkennen, daß die Modelle einen viel größeren Parameterbereich als die Mira–Veränderlichen umfassen. Die Verteilung der Mira–Katalogdaten in Bezug auf deren Leuchtkraft bei gleicher Effektivtemperatur läßt für die Mira–Veränderlichen auf einen zulässigen Bereich der Schwerebeschleunigung von  $\log g = -1.0$  bis 0.5 schließen. Zumindest kann vermutet werden, daß bei ihnen keine Schwerebeschleunigungen von mehr als  $\log g = 1.0$  auftreten. Der Temperaturbereich ist relativ groß, es sind Temperaturen im Bereich von 2100 K bis zu 3900 K im Katalog verzeichnet.

Für den im Kapitel 4 durchgeführten Vergleich mit einer Reihe von beobachteten Mira– Veränderlichen kann also erwartet werden, daß sie in Bereiche ähnlicher Temperaturen und Schwerebeschleunigungen einzuordnen sind. Dadurch, daß der Parameterbereich der Modelle größer gewählt wurde, läßt sich bei eventuell stark abweichenden ermittelten Werten auf Fehler in der Vergleichsmethode schließen.

Da Mira–Veränderliche Massen zwischen 0.6 und  $3.0M_{\odot}$  haben, wäre zu erwarten, daß die dargestellten Entwicklungswege (Baraffe *et al.*, 1995) im HRD auf Seite 25 im Bereich der Mira–Daten enden. Da das nicht eindeutig der Fall ist, kann entweder ein zu klein gewählter Datensatz im Mira–Katalog die Ursache sein oder aber die Entwicklungswege und die Größen im Mira–Katalog enthalten gegeneinanderwirkende systematische Fehler.

#### 3.2 Stabilität der Modelle

Als konvergierte Modelle werden in diesem Zusammenhang Modelle bezeichnet, deren Temperaturkorrektur zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationen und der Fehler in der Energie pro Atmosphärenschicht kleiner als ein festgesetzter Wert sind. Als Richtwert läßt sich sagen, daß das Modell als konvergiert angesehen werden kann, wenn für jede Atmosphärenschicht l zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationen  $\Delta T_l < 10 \,\mathrm{K}$  und  $\Delta E_l < 5\%$  gilt.  $\Delta E_l$  ist die relative Abweichung der über alle Frequenzen integrierten mittleren Intensität von dem durch die Planck–Funktion gegebenen Fluß

$$\Delta E_{\rm l} = 1 - \frac{\overline{\kappa}_{\rm j,l}}{\overline{\kappa}_{\rm b,l}}.$$

Hauptsächlich im Bereich von  $\log g = -1.0$  und  $T_{\rm eff} > 3700 \,\mathrm{K}$  ist der Strahlungsdruck so groß, daß der Gasdruck negativ sein müsste, um die gewünschte Schwerebeschleunigung an der Oberfläche zu erhalten (s. Gleichung 2.52). Das heißt, diese Modelle sind physikalisch instabil und können mit den Vorgaben nicht berechnet werden.

Wie weiter unten erläutert wird, sind Modelle mit geänderten Häufigkeiten von Kohlenstoff und Sauerstoff gerechnet worden. Bei Modellen mit einem C/O–Verhältnis von 1.2 gab es im Bereich  $T_{\text{eff}} = 2000 \dots 2300 \,\text{K}$  einige Modelle, die instabil waren.

Wahrscheinlich besteht ein Zusammenhang mit der Staubentstehung in den Modellen. Die Staubkonzentration kann sich bei einigen Temperaturen sprunghaft ändern es gibt dort einen Phasenübergang. Wenn in den Modellen eine Temperaturänderung durchgeführt wird, wie es bei der Temperaturkorrektur der Fall ist, können bereits kleine Temperaturschwankungen um die Sprungtemperatur herum die Staubkonzentration von


Abbildung 3.5: Übersicht über die gerechneten Modellgitter. Stabile Modelle sind mit einem Punkt (·) gekennzeichnet. Modelle, dessen Strahlungsdruck zu hoch ist, so daß sie bei der gewünschten Schwerebeschleunigung nicht stabil sein können, sind mit  $\diamond$  markiert. Mit  $\triangle$  sind die Modelle bezeichnet, die durch die Staubbildung instabil wurden.

Iteration zu Iteration stark verändern. Diese Modelle sind nicht stabil, da die numerische Behandlung dieser physikalischen Gegebenheit in diesem Punkt noch zu verbessern ist.

In Abbildung 3.5 ist dargestellt, welche Modelle berechnet wurden und ob sie stabil sind. Dabei sind pro Effektivtemperatur und  $\log g$  fünf Modelle mit den entsprechenden C/O–Verhältnissen zu sehen.

# 3.3 Änderung des Kohlenstoff–Sauerstoff–Verhältnisses

Das Programmpaket PHOENIX kann die Atmosphären mit beliebig vorgegebenen Elementhäufigkeiten berechnen. Zunächst wurden Modelle mit solaren Häufigkeiten berechnet, wie sie von Wasserstoff bis Eisen in Tabelle 3.3 angegeben sind. Die darauffolgende Tabelle 3.4 zeigt solare Häufigkeiten nach Grevesse und Sauval (1998). Per Konvention sind die Häufigkeiten logarithmisch relativ zu  $10^{12}$  Wasserstoffatomen angegeben.

Wie bereits erwähnt, spielt bei niedrigen Temperaturen die Bildung von Molekülen eine große Rolle. Insbesondere sind in den Spektren der M–Miras (C/O < 1) starke Ab-

El.	$\log \varepsilon$	El.	$\log \varepsilon$
Н	12.00	Si	7.55
He	10.99	Р	5.45
Li	3.31	S	7.21
Be	1.15	Cl	5.50
В	2.60	Ar	6.52
С	8.55	Κ	5.12
Ν	7.97	Ca	6.36
0	8.87	$\mathbf{Sc}$	3.10
F	4.56	Ti	5.02
Ne	8.08	V	4.00
Na	6.33	$\operatorname{Cr}$	5.67
Mg	7.58	Mn	5.39
Al	6.47	Fe	7.50

Tabelle 3.3: Auszug solarer Häufigkeiten von Wasserstoff bis Eisen, wie sie in PHOENIX benutzt werden. Die Werte orientieren sich an Grevesse *et al.* (1992).

El.	$\log \varepsilon$	$\pm \log \varepsilon$	El.	$\log \varepsilon$	$\pm \log \varepsilon$
Η	12.00		Si	7.55	0.05
He	10.93	< 0.01	Р	5.45	0.04
$\mathrm{Li}^*$	1.10	0.10	$\mathbf{S}$	7.33	0.11
Be	1.40	0.09	Cl	5.28	0.06
В	2.79	0.05	Ar	6.40	0.06
С	8.52	0.06	Κ	5.12	0.13
Ν	7.92	0.06	Ca	6.36	0.02
0	8.83	0.06	$\mathbf{Sc}$	3.17	0.10
F	4.48	0.06	Ti	5.02	0.06
Ne	8.08	0.06	V	4.00	0.02
Na	6.33	0.03	$\operatorname{Cr}$	5.67	0.03
Mg	7.58	0.05	Mn	5.39	0.03
Al	6.47	0.07	Fe	7.50	0.05

Tabelle 3.4: Auszug solarer Häufigkeiten von Wasserstoff bis Eisen nach Grevesse und Sauval (1998). Die Werte sind auf [H] = 12.0 normiert. Die Lithiumhäufigkeit, die aus Messungen an Meteoriten bestimmt wurde, unterscheidet sich von der in der Sonne und beträgt  $3.31 \pm 0.04$ .

sorptionsbanden von TiO, VO und H<sub>2</sub>O zu erkennen, weil diese einen großen Beitrag zur Opazität liefern. Wenn C und O zu gleichen Teilen vorhanden sind, werden sie praktisch vollständig in CO gebunden. CO ist aufgrund seiner hohen Dissoziationsenergie das stabilste und in kühlen Sternatmosphären das am häufigsten vorkommende Molekül. In Mira–Veränderlichen vom Typ C, also bei C/O > 1, ist praktisch der gesamte Sauerstoff im CO gebunden, so daß die für die Opazitäten wichtigen Moleküle TiO, VO und H<sub>2</sub>O kaum noch vorhanden sind. Stattdessen wird aus den überschüssigen Kohlenstoffatomen C<sub>2</sub> und CN gebildet. Durch die Dominanz von CO ist eine starke Veränderlichkeit der Spektren bei kleinen Abweichungen des C/O–Verhältnisses bei Miras vom Typ S (C/O  $\approx$  1) zu erwarten. Die Klassifizierung der Mira–Veränderlichen in die Typen C, M und S anhand ihrer C/O–Verhältnisse deutet schon auf eine starke Veränderlichkeit in den Spektren bei Variation von C/O hin.

PHOENIX verwendet als Eingabe der chemischen Häufigkeit für Kohlenstoff und Sauerstoff absolute Werte, die sich alleine aus einem C/O–Verhältnis nicht ermitteln lassen. Die dazugehörigen absoluten Häufigkeiten wurden daher vereinfacht so gewählt, daß die Gesamtzahl an Kohlenstoff- und Sauerstoffatomen konstant blieb. Somit berechnen sich die in logarithmischer Form angegebenen Häufigkeiten[C'], bzw. [O'] bei einem gewünschten C/O–Verhältnis (C/O)' bei solaren Häufigkeiten [C] = 8.55 und [O] = 8.87 wie folgt:

$$[C]' = \log\left(10^{[C]} + \frac{10^{[O]} \cdot (C/O)' - 10^{[C]}}{1 + (C/O)'}\right)$$
(3.2)

$$[O]' = \log\left(10^{[O]} - \frac{10^{[O]} \cdot (C/O)' - 10^{[C]}}{1 + (C/O)'}\right)$$
(3.3)

Um zu prüfen, ob für eine sichtbare Veränderung in den Spektren die absoluten Kohlenstoff- bzw. Sauerstoffhäufigkeiten anstelle der C/O-Verhältnisse relevant sind, wurden fünf Modelle mit einem festen C/O-Verhältnis von 1.2 und Änderungen der absoluten C- und O-Häufigkeiten berechnet. Als Modellparameter wurden  $T_{\text{eff}} = 3200 \text{ K}$  und  $\log g = 0.0$  verwendet. Die absoluten Häufigkeiten für das gewünschte Verhältnis betragen laut Gleichung 3.2 und 3.3 [C] = 8.78 und [O] = 8.70. Diese wurden jeweils in Schritten von 0.1 um bis zu 0.3 erhöht bzw. erniedrigt. Tabelle 3.5 zeigt die absoluten Häufigkeiten sowie deren relative Änderung abweichend von den durch Gleichung 3.2 und 3.3 berechneten Verten. In der dritten Spalte ist die relative Abweichung der jeweiligen Spektren bzgl. des mit [C] = 8.78 und [O] = 8.70 berechneten Spektrums angegeben. Die berechneten Spektren sind in Abbildung 3.7 zu sehen.

Es ist zu erkennen, daß sich bei einem gleichbleibenden Verhältnis von Kohlenstoff zu Sauerstoff die Spektren nur wenig ändern. Wie in Abbildung 3.8 zu sehen ist, ändern sich die relativen Partialdrücke der kohlenstoff- und sauerstoffhaltigen Verbindungen nur um ungefähr eine halbe Größenordnung.

Im weiteren Verlauf werden unter der Bezeichnung w/C-Verbindungen (with carbon) Kohlenstoff und alle kohlenstoffhaltigen Verbindungen, die *keinen* Sauerstoff enthalten, zusammengefasst<sup>2</sup>. Analog verhält es sich mit der Bezeichnung w/O (with oxygen) im Fall von Sauerstoff. Die einzelnen Molekülverbindungen wurden aus der Ausgabe von

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Das gilt für die Verbindungen, die in PHOENIX berücksichtigt werden.



Abbildung 3.6: Abhängigkeit der Absoluten Häufigkeiten von Kohlenstoff und Sauerstoff vom relativem Verhältnis beider Elemente. Die Berechnung erfolgt anhand von Gleichung 3.2 und 3.3, wobei [C] = 8.55 und [O] = 8.87.

[C]	[O]	$\pm~{\rm dex}$	$\frac{\sum  s-s_0 }{\sum s_0}$	C/O
8.48	8.40	-0.30	6.28~%	1.2
8.58	8.50	-0.20	4.21~%	1.2
8.68	8.60	-0.10	2.11~%	1.2
8.78	8.70	—	—	1.2
8.88	8.80	+0.10	2.11~%	1.2
8.98	8.90	+0.20	4.22~%	1.2
9.08	9.00	+0.30	6.30~%	1.2

Tabelle 3.5: Änderungen der absoluten Häufigkeiten von C und O zur Überprüfung, ob sich die Modelle bei einem gleichbleibenden C/O-Verhältnis (hier C/O = 1.2) signifikant ändern. Dabei hat das Referenzmodell die aus Gleichung 3.2 und Gleichung 3.3 berechneten Häufigkeiten [C] = 8.78 und [O] = 8.70. Die relative Abweichung der Spektren *s* zum Referenzspektrum  $s_0$  (Modell mit [C] = 8.78 und [O] = 8.70) wurde mit  $\sum |s_i - s_{i,0}| / \sum s_{i,0}$  berechnet. Die Spektren sind in Abbildung 3.7 aufgetragen.



Abbildung 3.7: Vergleich der Spektren der Modelle mit gleichem C/O-Verhältnis, aber verschiedenen absoluten Häufigkeiten von C und O, wie in Tabelle 3.5 angegeben. Das Modell aus dem das mittlere Spektrum stammt, hat die Häufigkeiten [C] = 8.78, [O] = 8.70. Für eine bessere Ansicht sind die Spektren geglättet worden. Die relativen Fehler der einzelnen Spektren zum mittleren sind ebenfalls in Tabelle 3.5 zu sehen.

PHOENIX entnommen und sind im Anhang B.2 aufgeführt. Zum Partialdruck liefern C und O gegenüber den restlichen Verbindungen den jeweils größten Anteil.

Mit steigender Häufigkeit von Kohlenstoff und Sauerstoff steigen die Partialdrücke von C, O und CO, im Gegensatz zu den Partialdrücken von TiO, VO und H<sub>2</sub>O, die sich kaum ändern, an, was vermutlich an der hohen Dissoziationsenergie des Kohlenmonoxids liegt.

#### 3.3.1 Erstellung von Partialdrucktabellen für $C/O = 0.1 \dots 2.0$

PHOENIX kann direkt mit vorgegebenen Häufigkeiten rechnen, was jedoch einen Anstieg der Laufzeit des Programms um bis zu einem Faktor 10 bedeuten kann, da die Partialdrücke der einzelnen Spezies ständig neu berechnet werden müssen. Um dies zu vermeiden, wurden Partialdrucktabellen für die entspechenden Häufigkeiten vorberechnet. Aus diesen können während der Modellrechnungen die Partialdrücke direkt ausgelesen werden, was die Rechenzeit deutlich verringert. Die Berechnung der Tabellen nimmt in der derzeitigen PHOENIX – Version pro Partialdrucktabelle 96 CPUs und ungefähr 13 – 20 Stunden



Abbildung 3.8: Relative Partialdrücke von kohlenstoff- und sauerstoffhaltigen Verbindungen in Abhängigkeit der optischen Tiefe. Angegeben sind die Absoluthäufigkeiten [C] = 8.84, 8.78, 9.08 bzw. [O] = 8.40, 8.70, 9.00 bei einem C/O-Verhältnis von 1.2. w/C faßt Kohlenstoff und alle Verbindungen, die Kohlenstoff, aber kein Sauerstoff enthalten zusammen. Analog verhält es sich mit w/O. Wie zu erkennen ist, ändern sich die Partialdrücke in den optisch dicken Schichten nur wenig.

Rechenzeit in Anspruch, was verglichen mit der erwarteten Zeitersparnis aufgrund der häufigen Verwendung einer Tabelle jedoch gerechtfertigt ist. Es wurden insgesamt Partialdrucktabellen für den Bereich  $C/O = 0.1, 0.2, \ldots, 2.0$  berechnet.

Es soll nun das Verhalten der Modelle analysiert werden, die Häufigkeiten um  $C/O \approx 1.0$  aufweisen. Die Vermutung liegt nahe, daß es bei C/O = 1.0 zu einem Phasenübergang bzgl. der Molekülverhältnisse in der gesamten Atmosphäre oder in Teilen darin kommt. Dafür wurden weitere Tabellen berechnet, so daß ebenfalls der Bereich von C/O = 0.90, 0.95, 0.99, 1.00, 1.01, 1.05 und 1.10 abgedeckt werden kann.

Mit den erstellten Partialdrucktabellen sollten für die entsprechenden C/O–Verhältnisse die Modellgitter berechnet werden. Aus Gründen der knappen zur Verfügung stehenden Rechenzeit auf dem benutzten Großrechnersystem<sup>3</sup> wurden Modellgitter lediglich mit C/O = 0.4, 0.48 (solar), 0.8, 1.0 und 1.2 berechnet. Für den Bereich um C/O  $\approx 1.0$ 

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN), http://www.hlrn.de/

wurde jeweils ein exemplarisches Modell mit  $T_{\text{eff}} = 2700 \,\text{K}$  und  $\log g = 0.0$  erstellt.

#### 3.3.2 Verhalten der Modelle bei $C/O \approx 1.0$

Es wurde das Verhalten der Modelle für C/O-Verhältnisse von ungefähr eins untersucht. Dabei wurde das Hauptaugenmerk auf die Partialdrücke von Verbindungen gerichtet, die Kohlenstoff, aber kein Sauerstoff enthalten (w/C), und analog Verbindungen, die Sauerstoff, aber kein Kohlenstoff enthalten (w/O). Beispielhaft dafür wurden Modelle mit  $T_{\rm eff} = 2700 \,\mathrm{K}$  und log g = 0.0 gerechnet.

An den Spektren (Abbildung 3.9) läßt sich sehen, daß sich ihre Charakteristika im Bereich von C/O = 0.9...1.1 stark ändern. Für Modelle mit  $T_{\text{eff}} = 2700 \text{ K}$  und  $\log g = 0.0$  wird bei Zunahme von C/O die molekulare Absorption im Bereich von  $0.5 - 1.4 \,\mu\text{m}$  schwächer. Auf der anderen Seite nimmt sie im Bereich von  $2.1 - 2.3 \,\mu\text{m}$  zu.

Wie auch in der Analyse der Modelle mit C/O = 0.4, 0.8 und 1.2 ebenfalls erkennbar ist, ändert sich bei gleichbleibenden Parametern die Charakteristik der Spektren mit C/O < 0.9 bzw. C/O > 1.1 nicht mehr wesentlich.

Abbildung 3.10 zeigt die Partialdrücke von w/C- und w/O-Verbindungen für die entsprechenden C/O-Verhältnisse in Abhängigkeit der optischen Tiefe. Bei C/O = 1.0 sind die Partialdrücke der w/C-Verbindungen erwartungsgemäß genauso groß wie die der w/O-Verbindungen. Im Bereich von C/O =  $1.0 \pm 0.1$  und ab einer optischen Tiefe von  $\tau < 10$ dominiert der Partialdruck von CO gegenüber w/C und w/O. Bei C/O = 0.9 sinkt der Partialdruck aller w/C-Verbindungen von ungefähr  $5 \cdot 10^{-4} P_{\text{gas}}$  bei  $\tau = 10^2$  auf  $3 \cdot 10^{-13} P_{\text{gas}}$ bei  $\tau = 10^{-6}$  ab, während der aller w/O-Verbindungen von ungefähr  $5 \cdot 10^{-4} P_{\text{gas}}$  auf nur  $1 \cdot 10^{-4} P_{\text{gas}}$  abfällt.

Umgekehrt (bei C/O = 1.1) fällt der Partialdruck aller w/C-Verbindungen von  $5 \cdot 10^{-4} P_{\text{gas}}$  auf  $5 \cdot 10^{-5} P_{\text{gas}}$  und der aller w/O-Verbindungen von  $5 \cdot 10^{-4} P_{\text{gas}}$  auf  $5 \cdot 10^{-10} P_{\text{gas}}$  In einer ersten Annahme hätte ein symmetrisches Verhalten erwartet werden können, also daß sich die Partialdrücke der w/C-Verbindungen bei C/O = 1.1 so verhalten wie die Partialdrücke der w/O-Verbindungen bei C/O = 0.9 und umgekehrt. Daß dies nicht der Fall ist, liegt vermutlich an der unterschiedlichen Bindungsenergie der Moleküle, die Sauerstoff enthalten gegenüber denen die Kohlenstoff enthalten.

Wie erwartet, steigen bei fallendem C/O–Verhältnis die Partialdrücke von TiO, VO und  $H_2O$  stetig an, da mehr Sauerstoff zur Bildung dieser Moleküle zur Verfügung steht. Von diesen drei Verbindungen ist  $H_2O$  vor TiO und VO die mit den größten Partialdrücken.



Abbildung 3.9: Verschiedene Spektren für Modelle mit  $T_{\rm eff} = 2700 \,\mathrm{K}$  und  $\log g = 0.0$  und C/O–Verhältnissen von 0.90, 0.95, 0.99, 1.00, 1.01, 1.05 und 1.10, die zur besseren Übersicht geglättet wurden.



Abbildung 3.10: Verschiedene Partialdrücke für Modelle mit  $T_{\rm eff}=2700\,{\rm K}$  und  $\log g=0.0.$ Links von oben nach unten und rechts von unten nach oben mit C/O–Verhältnissen von 0.90, 0.95, 0.99, 1.00, 1.01, 1.05 und 1.10.

#### 3.3.3 Verhalten der Modelle bei C/O = 0.4, 0.8 und 1.2

Aus den 1040 Modellen wurden exemplarisch 18 mit den Parametern  $T_{\rm eff} = 2200, 3200, 4200 \,\mathrm{K}, \log g = 0.0, 2.5 \,\mathrm{und} \,\mathrm{C/O} = 0.4, 0.8, 1.2$  herausgegriffen, um das gesamte Modellgitter ausschnittsweise zu repräsentieren.

Aus den Modellen wurden die wichtigsten Verbindungen, die Kohlenstoff und/oder Sauerstoff enthalten, bzw. Kohlen- und Sauerstoff selbst, anhand der größten Partialdrücke bei einer optischen Tiefe  $\tau = 1.0$  selektiert. Diese Verbindungen sind in Liste 3.1 zu sehen. Kohlenstoff und Sauerstoff sind am häufigsten vertreten, sowohl in ihrer neutralen, als

> C, O, C<sup>+</sup>, O<sup>+</sup>, CO, CO<sub>2</sub>, CH, C<sub>2</sub>, CN, OH, NO, SiO, H<sub>2</sub>O, TiO, HCN, SC

Liste 3.1: Die wichtigsten kohlenstoff- und sauerstoffhaltigen Verbindungen bzw. die Elemente selbst, die in den Modellen in der Atmosphärenschicht bei  $\tau = 1$  vorkommen. Die Partialdrücke der einzelnen Spezies sind stark vom C/O-Verhältnis und von der Temperatur abhängig.

auch in ihrer einfach ionisierten Form. Als wichtigste Verbindung ist das Kohlenmonoxid zu nennen, das einen hohen Einfluß in der Zustandsgleichung hat, aber in den Spektren nur in zwei Bereichen deutlich sichtbar ist  $(2.2 - 2.4 \text{ und ca. } 4 - 6 \,\mu\text{m})$ .

Die Partialdrücke einiger Moleküle und die Spektren der 18 Modelle sind in Auszügen in Abbildung 3.11 (mit Kennzeichnung der Bereiche von Molekülbanden) und Abbildung 3.12 oder vollständig im Anhang B.3 zu finden.

An den Spektren ist zu sehen, daß die Absorption im Bereich von 1.34 - 1.53 und  $1.77 - 1.95\,\mu\mathrm{m}$  bei einem Anstieg von  $T_{\mathrm{eff}} = 2200$  auf 3200 K deutlich abnimmt. Es handelt sich dabei um einen Bereich, der stark von Molekülbanden des H<sub>2</sub>O dominiert ist.

Die TiO–Banden bei 0.78 und 0.89  $\mu$ m sind bei einem C/O–Verhältnis von 0.4 und 0.8 bei  $T_{\rm eff} = 2200$  K undeutlich und bei 3200 K deutlich sichtbar. Erhöht sich das C/O–Verhältnis auf 1.2, so verschwinden die Absorptionsbanden und es sind sogar Pseudo–Emissionslinien zu sehen. Wie bereits erwähnt, ist dies durch die Reaktionsfreudigkeit des Kohlenmonoxids verursacht, wodurch bei einem hohen Anteil an Kohlenstoff nur noch wenig Sauerstoff für eine Bindung mit anderen Atomen zur Verfügung steht. Bei 4200 K sind die TiO–Banden ebenfalls nicht mehr zu sehen, da das Molekül bei dieser Temperatur bereits dissoziiert, was an dessen niedrigem Partialdruck zu erkennen ist. Der beschriebene Effekt ist beim VO weniger deutlich sichtbar.

Die wichtigsten Absorptionsbanden der Moleküle TiO, H<sub>2</sub>O, VO und CO im Bereich von  $0.6 - 5.0 \,\mu\text{m}$  sind in Tabelle 3.6 zu finden.

Bei der Betrachtung der in Abbildung 3.12 gezeigten Partialdrücke ist zu erkennen, daß sich die Partialdrücke sauerstoffhaltiger Moleküle bei gleichbleibender Temperatur und gleicher Schwerebeschleunigung nicht ändern, sofern das C/O-Verhältnis unterhalb von eins liegt. Beispielsweise liegt der Partialdruck von H<sub>2</sub>O im Maximum konstant bei ungefähr  $10^{-4}$  dyn/cm<sup>2</sup> ( $T_{\rm eff} = 3200$  K). Erst bei einem Anstieg von C/O auf 1.2 sinkt er bei gleichbleibendem Gasdruck deutlich auf ungefähr  $3 \cdot 10^{-8}$  dyn/cm<sup>2</sup> ab.

Bei  $T_{\rm eff} = 4200 \,\mathrm{K}$  ist der Effekt ebenfalls noch sichtbar, jedoch sind die Drücke der Verbindungen bereits deutlich niedriger, weil viele Moleküle aufgrund der hohen Temperatur bereits aufgespalten sind.



Abbildung 3.11: Spektren der Modelle mit den Parametern  $T_{\rm eff} = 2200$  und 3200 K,  $\log g = 0.0$  und C/O = 1.2. Zur besseren Ansicht sind die Spektren geglättet worden. Zusätzlich sind einige ausgewählte Bereiche von Molekülbanden eingezeichnet.



Abbildung 3.12: Partialdrücke der Modelle mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200,~4200\,{\rm K},$   $\log g=0.0$  und C/O = 0.4, 0.8, 1.2.

43

Molekül	$\lambda_{ m von}/\mu{ m m}$	$\lambda_{\rm bis}/\mu{\rm m}$	Ref.
CO	2.20	2.40	[3]
	4.30	4.60	"
TiO	0.66	0.68	[2]
	0.70	0.72	"
	0.77	0.79	[1]
	0.88	0.90	"
VO	0.73	0.75	[2]
	1.04	1.06	[1]
$H_2O$	1.10	1.24	[4]
	1.34	1.53	"
	1.77	1.95	"

Tabelle 3.6: Ausgesuchte Molekülbanden von TiO, VO, CO und H<sub>2</sub>O im Bereich von 0.6 -  $5.0 \,\mu$ m. [1]: Alvarez und Mennessier (1997), [2]: Castelaz und Luttermoser (1997), [3]: Pavlenko und Jones (2002), [4]: Persson *et al.* (1977), Schultheis *et al.* (2003) sowie Lançon und Wood (2000)

## 3.4 Abhängigkeit der Spektren vom gewählten $\tau$ -Gitter

Wird in der Ansicht der Spektren auf eine Glättung verzichtet, so ist bei einigen erkennbar, daß die untere Einhüllende des Spektrums eine Planckfunktion darstellt. In der oben erwähnten Stichprobe von 18 Modellen tritt der Effekt hauptsächlich bei hohen Temperaturen und niedrigem log g auf, beispielsweise bei dem Modell mit  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$ , log  $g = 0.0 \,\mathrm{und} \,\mathrm{C/O} = 1.2$  (Abbildung 3.13, links oben). Dabei ist die thermische Strahlung der äußeren Schicht zu sehen. Dies ist kein physikalischer, sondern ein Modellierungseffekt, der durch ein ungünstig gewähltes optisches Tiefengitter ( $\tau$ -Gitter) zustandegekommen ist. Die berechneten Atmosphären haben Schichten mit einer optischen Tiefe von  $\tau_i = 10^2$  (im Atmosphäreninneren) bis  $\tau_o = 10^{-6}$  (außen).

Um zu verifizieren, daß dieser Effekt durch die Wahl einer optisch zu dick gewählten äußeren Schicht zustandegekommen ist, wurde die optische Tiefe der äußeren Atmosphärenschicht von  $\tau = 10^{-6}$  für die gleichen Modellparameter jeweils auf  $\tau = 10^{-8}$ ,  $10^{-10}$  und  $10^{-12}$  erniedrigt. Die ungeglätteten Spektren zu den erneut erstellten Modellen sind in Abbildung 3.13 zu sehen.

In Abbildung 3.14 ist deutlich zu sehen, welcher relative Fehler in den Spektren entsteht. Die Graphik auf der oberen linken Seite zeigt die relative Veränderung im Fluß des Spektrums beim Übergang von  $\tau = 10^{-6}$  auf  $\tau = 10^{-8}$  in der äußeren Schicht. Alle Spektren in der Abbildung wurden geglättet, so daß sie der Auflösung der in Kapitel 4 vorgestellten beobachteten Spektren entsprechen. Es ist zu sehen, daß die relative Veränderung teilweise bis zu 25% beträgt, worauf weiter unten nochmals eingegangen wird. Wie auf der rechten Seite der Abbildung zu sehen, ist die relative Veränderung beim Übergang von  $\tau = 10^{-8}$  auf  $\tau = 10^{-10}$  weitaus geringer. Sie beträgt bis auf den Bereich von  $3.0 - 3.5 \,\mu$ m weniger als 5%, so daß eine weitere Veringerung von  $\tau$  nicht notwendig ist.

In Abbildung 3.15 sind die zu dem Modell gehörigen absoluten Partialdrücke, sowie der Gesamtgasdruck gegen die optische Tiefe aufgetragen. Der Gasdruck nimmt bei abnehmender optischen Tiefe ab und strebt gegen einen beliebig niedrig gesetzten Wert  $P_{\rm out}$ , der hier  $10^{-4}$ dyn/cm<sup>2</sup> beträgt. In der Darstellung, in der die äußerste Schicht die optische Tiefe  $10^{-12}$  hat (rechts unten), ist zu erkennen, daß sich der Gasdruck bei ungefähr  $\tau \approx 10^{-9}$  nach außen nicht weiter erniedrigt, sondern dort bereits  $P_{\rm gas} \approx P_{\rm out}$  gilt.

 $P_{\rm out}$  wird in PHOENIX zum einen als äußerer Startwert zur Berechnung der Hydrostatik der Atmosphärenschichten benutzt. Zum anderen verhindert er durch seine formale Eigenschaft als Gegendruck, daß sich die Atmosphäre unendlich weit ausdehnt. Abbildung 3.16 zeigt die Partialdrücke für zwei Modelle mit jeweils einer optischen Tiefe von  $\tau = 10^{-12}$  in der äußeren Schicht und einem Außendruck von  $P_{\rm out} = 10^{-4}$  bzw.  $10^{-6}$  dyn/cm<sup>2</sup>.

Da der Gasdruck bei  $\tau = 10^{-9}$  in beiden Modellen ungefähr  $10^{-4}$  dyn/cm<sup>2</sup> beträgt, sollte bei zukünftigen Rechnungen (bei denen der in dieser Arbeit verwendete Bereich der Modellparameter benutzt wird) eine optische Dicke von  $10^{-9}$  in der äußersten Schicht und  $P_{\rm out} = 10^{-4}$  benutzt werden. Für den Fall, daß  $\tau < 10^{-9}$  gesetzt wird, muß  $P_{\rm out}$  ebenfalls heruntergesetzt werden.

Die gemittelten Opazitäten (Plancksches, Absorptions, Rosselandsches und das flußgewichtete Mittel) in Abhängigkeit der optischen Tiefe für die jeweils *äußere* Schicht sind in Tabelle 3.7 bzw. Abbildung 3.17 (oben) aufgetragen. Es fällt auf, daß bei Modellen mit der äußeren optischen Tiefe  $\tau = 10^{-6}$  (bei denen im Spektrum die untere Einhüllende in



Abbildung 3.13: Spektren von Modellen mit  $T_{\text{eff}} = 3200 \text{ K}$ ,  $\log g = 0.0 \text{ und C/O} = 1.2$ . Dabei wurde das optische Tiefengitter derart geändert, daß die äußerste Atmosphärenschicht eine optische Tiefe von  $\tau_o = 10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$  und  $10^{-12}$  hat. Die untere Einhüllende des Spektrums mit  $\tau_o = 10^{-6}$  hat die deutliche Form einer Planckkurve. Eine Verringerung der optischen Dicke unterhalb von  $10^{-8}$  für die äußerste Schicht hat nur einen geringen Effekt auf das Spektrum.

Form einer Planck–Kurve auftritt) das Absorptions Mittel  $\overline{\kappa}_j$  größer ist, als das Plancksche Mittel  $\overline{\kappa}_b$ . In den übrigen betrachteten Modellen gilt für die äußeren Schichten stets  $\overline{\kappa}_j < \overline{\kappa}_b$ .

Da eine Abhängigkeit des Effekts von  $\log g$  festzustellen war, wurden die gemittelten Opazitäten der äußeren Schichten in Abhängigkeit der Schwerebeschschleunigung eingetragen, was in Abbildung 3.18 zu sehen ist. Hier zeigt sich, daß für  $\log g \leq 1.0 \ \overline{\kappa}_j < \overline{\kappa}_b$ und für  $\log g \geq 1.0 \ \overline{\kappa}_j > \overline{\kappa}_b$  gilt. Die Vermutung liegt nahe, daß  $\overline{\kappa}_j/\overline{\kappa}_b$  als Indikator zur Prüfung benutzt werden kann, ob der oben beschriebene Effekt auftritt. Eine Überprüfung der Spektren der 18 ausgewählten Modellen ergab, daß dies tatsächlich der Fall ist. Lediglich bei  $\overline{\kappa}_j/\overline{\kappa}_b \approx 1$  konnte keine eindeutige Aussage gemacht werden, weil die Entscheidung, ob die untere Einhüllende eine Planck–Kurve zeigt, in Grenzfällen subjektiv ist.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß durch die hier beschriebene Veränderung des optischen Tiefengitters die Spektren konsistenter modelliert werden können. Die Abweichungen von bis zu 25% in dem exemplarisch gerechneten Spektrum zeigen dies deutlich. Das hat Einfluß auf den Vergleich der Modellspektren mit den beobachteten, worauf in Kapitel 4 eingegangen wird. Die Modelle sind aus Sicht der Atmosphärenstruktur gültig, weil sich, wie oben beschrieben, der Gasdruck und die Partialdrücke kaum ändern. Wenn sichergestellt ist, daß in künftigen Rechnungen das Verhältnis  $\overline{\kappa}_j/\overline{\kappa}_b < 1$  zutrifft, sollte in der Spektrumsynthese ein derartiger Fehler nicht mehr auftreten. Leider war es aus Zeitgründen (Rechenzeit der Modelle) nicht mehr möglich, alle 1040 Modelle auf ein geändertes  $\tau$ -Gitter umzurechnen.



Abbildung 3.14: Spektren von Modellen mit  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$ , log  $g = 0.0 \,\mathrm{und} \,\mathrm{C/O} = 1.2$ . Abgebildet sind die relativen Spektren der Modelle mit  $\tau = 10^{-6} \,\mathrm{und} \,\tau = 10^{-8}$ , bzw.  $\tau = 10^{-8} \,\mathrm{und} \,\tau = 10^{-10}$  zueinander. In der unteren Reihe sind die dazugehörigen Spektren im direkten Vergleich zu sehen. Sie wurden auf eine Auflösung von  $\lambda/\Delta\lambda = 2000$  bei  $\lambda_0 = 0.75 \,\mu\mathrm{m}$  heruntergerechnet.



Abbildung 3.15: Gesamt- und Partialdrücke von Modellen mit  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$ ,  $\log g = 0.0 \,\mathrm{und} \,\mathrm{C/O} = 1.2$ . Dabei wurde das optische Tiefengitter derart geändert, daß die äußerste Atmosphärenschicht eine optische Tiefe von  $\tau_o = 10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10} \,\mathrm{und} \,10^{-12}$  hat. Unterhalb von  $\tau \approx 10^{-9}$  gilt  $P_{\rm gas} \approx P_{\rm out}$ .



Abbildung 3.16: Gesamt- und Partialdrücke von Modellen mit  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$ , log g = 0.0,  $\mathrm{C/O} = 1.2$  und  $\tau = 10^{-12}$ . In der linken Abbildung sind die Drücke bei einen Außendruck von  $P_{\rm out} = 10^{-4}$ , rechts die bei  $P_{\rm out} = 10^{-6} \,\mathrm{dyn/cm^2}$  zu sehen.

$\log_{10}(\tau_{\rm out})$	$\overline{\kappa}_b/\mathrm{cm}$	$\overline{\kappa}_j/\mathrm{cm}$	$\overline{\chi}_r/\mathrm{cm}$	$\overline{\chi}_f/\mathrm{cm}$
-6	$7.0 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-15}$	$7.8 \cdot 10^{-18}$
-8	$2.6 \cdot 10^{-15}$	$7.1 \cdot 10^{-16}$	$3.1 \cdot 10^{-16}$	$7.3 \cdot 10^{-19}$
-10	$4.4 \cdot 10^{-16}$	$8.0\cdot10^{-17}$	$5.9\cdot10^{-17}$	$1.2\cdot10^{-19}$
-12	$3.9\cdot10^{-16}$	$7.3\cdot10^{-17}$	$5.6 \cdot 10^{-17}$	$6.7\cdot10^{-20}$

Tabelle 3.7: Mittlere Opazitäten in den äusseren Schichten der Modelle mit einer minimalen optischen Tiefe von jeweils  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$  und  $10^{-12}$ . Angegeben ist jeweils das Plancksche, Absorptions, Rosselandsche- und das flußgewichtete Mittel ( $\overline{\kappa}_b$ ,  $\overline{\kappa}_j$ ,  $\overline{\chi}_r$  und  $\overline{\chi}_f$ )



Abbildung 3.17: Mittlere Opazitäten in der äußersten Atmosphärenschicht aus verschiedenen Modellen in Abhängigkeit des Gasdrucks. Das Modell hat eine Effektivtemperatur von  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$  und C/O= 1.2. Die Abbildung zeigt die Opazitäten der Modelle mit geändertem  $\tau$ -Gitter bei log g = 0.0.



Abbildung 3.18: Mittlere Opazitäten in der äußersten Atmosphärenschicht aus verschiedenen Modellen in Abhängigkeit des Gasdrucks. Das Modell hat eine Effektivtemperatur von  $T_{\rm eff} = 3200 \,\mathrm{K}$  und C/O= 1.2. Die obere Abbildung zeigt die Opazitäten der Modelle mit geändertem log g bei  $\tau_o = 10^{-6}$ .

## 3.5 NLTE–Rechnungen

Es sollte untersucht werden, inwieweit die Annahme von LTE in den Modellen gerechtfertigt ist. Dazu wurden Modelle gerechnet, bei denen ausgehend von einem konvergierten LTE–Modell sukzessiv einzelne Elemente im NLTE behandelt wurden. Es wurden nacheinander die neutralen Elemente H, He, Li, C, N, O, Na, Mg, Al, Si und Ti in die NLTE–Behandlung eingebunden, wobei höhere Ionisationsstufen der Elemente im LTE gerechnet worden sind. Das Modell hat eine Effektivtemperatur von  $T_{\rm eff} = 3400 \,\mathrm{K}$ , log g = 0.0 und C/O= 0.48. In den Abbildungen 3.19 bis 3.23 sind die Abweichungskoeffizienten  $b_i$  für die berücksichtigten Elemente in Abhängigkeit der optischen Tiefe für die 60 unteren Energieniveaus aufgetragen, sofern so viele berechnet wurden. Die Behandlung von Molekülen im NLTE wurde in dieser Arbeit nicht berücksichtigt.

Es zeigt sich, daß die Abweichungen vom LTE für die betrachteten Elemente in der Größenordnung von eins ist. Im dünnen Teil der Atmosphäre, also ungefähr bei  $\tau < 10^{-3}$  dominieren die Übergänge durch Strahlung, so daß dort die Annahme von LTE nur noch begrenzt gültig ist.



Abbildung 3.19: Abweichungskoeffizienten für die untersten 60 Niveaus des neutralen Wasserstoff- und Heliumatoms in Abhängigkeit von der optischen Tiefe. Es werden insgesamt die Elemente H, He, Li, C, N, O, Na, Mg, Al, Si und Ti im NLTE behandelt.

Es fällt auf, daß die Abweichungskoeffizienten der hier im NLTE behandelten Alkalimetalle Li und Na, sowie von Ti deutlich größer sind, als die von C, N und O. Beim Natrium ist die Abweichung beispielsweise in der Natrium–D–Linie bei 5890 und 5896 Å sehr gut zu erkennen (Abbildung 3.24).

Abbildung 3.25 zeigt einen Vergleich von Spektren für das Modell im Falle der LTEund der NLTE–Rechnungen.. Der obere Teil zeigt die relative Änderung des Flusses im NLTE gegenüber dem im LTE ( $(F_{\text{NLTE}} - F_{\text{LTE}})/F_{\text{LTE}}$ ). Darunter sind beide Spektren direkt übereinander aufgetragen, wobei das NLTE–Spektrum gestrichelt dargestellt ist. Beide Spektren wurden für eine bessere Übersicht geglättet. Bei  $\lambda \approx 1.5 \,\mu\text{m}$  sind zwei deutliche Absorptionslinien zu erkennen. Bei der einen kann es sich um NI (1.46087 $\mu$ m) oder CI (1.4608724 $\mu$ m) handeln. Die zweite konnte in CI (1.4865 $\mu$ m) und MgI (1.48815 $\mu$ m) aufgelöst werden. Da die Magnesiumlinie im NLTE stärker als im LTE ist, muß auch die Besetzungszahl höher sein. Wie in Abbildung 3.22 (rechts) zu erkennen ist, sind die



Abbildung 3.20: Abweichungskoeffizienten des neutralen Lithium- und Kohlenstoffatoms in Abhängigkeit von der optischen Tiefe. Ansonsten siehe Abbildung 3.19.



Abbildung 3.21: Abweichungskoeffizienten des neutralen Stickstoff- und Sauerstoffatoms in Abhängigkeit von der optischen Tiefe.

Abweichungskoeffizienten bei  $\tau \approx 10^{-5} \dots 10^{-6}$  relativ hoch  $(b_i \approx 3.0)$ , so daß die Linie wahrscheinlich in einer der äußeren Schichten entsteht.

Sofern es nicht auf eine gute Auflösung von Atomlinien ankommt oder die Auflösung der berechneten Spektren erheblich erniedrigt werden soll, so mag LTE als eine gute Näherung für die Modellierung dienen. Das ist auch daran zu erkennen, daß einige Linien im NLTE je nach den ermittelten Besetzungszahlen (was durch die  $b_i$  ausgedrückt wird) stärker oder schwächer als ihre Pendants im LTE sind (siehe Abbildung 3.25). Diese Abweichung gleicht sich im Mittel jedoch aus. Wird auf eine möglichst präzise Behandlung von Atomlinien Wert gelegt, so ist die Behandlung der Elemente im NLTE sehr wichtig, wie bei der Modellierung der Na-D-Linie deutlich geworden ist.



Abbildung 3.22: Abweichungskoeffizienten des neutralen Natrium- und Magnesiumatoms in Abhängigkeit von der optischen Tiefe.



Abbildung 3.23: Abweichungskoeffizienten von Aluminium, Silizium und Titan.



Abbildung 3.24: Vergleich der Natrium–D–Linie bei Berechnung im LTE und NLTE.



Abbildung 3.25: Direkter Vergleich eines reinen LTE- und eines NLTE–Spektrums für das Modell  $T = 3400 \,\mathrm{K}$  und log g = 0.0. Oben ein relatives Spektrum mit  $(F_{\rm NLTE} - F_{\rm LTE})/F_{\rm LTE}$ , darunter die beiden geglätteten Spektren im direkten Vergleich. Das NLTE–Spektrum ist als gestrichelte Linie dargestellt.

# Kapitel 4

# Vergleich mit beobachteten Spektren

Modelle stellen einen idealisierten und genäherten Fall von Sternatmosphären dar, die deren Physik im Rahmen der gemachten Annahmen möglichst gut wiedergeben sollen, damit aus den Modellen beobachtbare Größen gewonnen werden können. Das setzt voraus, daß bei gegebenen Modellparametern die Lösungen eindeutig sind. Wenn dies der Fall ist und die Ergebnisse der Rechnungen den Beobachtungen entsprechen, so wird angenommen, daß die Modellparameter identisch mit den Größen der beobachteten Objekte sind. In diesem Kapitel wird der Vergleich von den Modellspektren mit Beobachtungen zur Gewinnung von Effektivtemperatur und C/O-Verhältnis der Mira-Veränderlichen beschrieben.

Spektren von Mira–Veränderlichen, die im Rahmen dieser Arbeit als Datensatz verwendet wurden, sind von Castelaz und Luttermoser (1997); Castelaz *et al.* (2000a) sowie Lançon und Wood (2000) im Verlauf mehrerer Jahre aufgenommen und zur Verfügung gestellt worden. Eine Beschreibung der Beobachtungen und der erhaltenen Spektren befindet sich in Abschnitt 4.1.

In Abschnitt 4.2 wird dargestellt, mit welchen Methoden die Übereinstimmung zwischen Modell- und beobachtetem Spektren bestimmt wird. Als Maß für die Übereinstimmung wurden die aus einem Vergleich mit den Spektren gewonnenen Korrelationskoeffizienten bzw. die  $\chi^2$ -Summe verwendet. Da alle Spektren bzgl. der Helligkeitsschwankung des Objekts phasenaufgelöst aufgenommen wurden, wird eine periodische Abhängigkeit der Größen erwartet.

Zum Abschluß werden die ermittelten Werte der Effektivtemperatur und des C/O-Verhältnisses in einer Übersicht dargestellt (Abschnitt 4.3). Dabei werden zwei Vergleiche von Modell- und beobachteten Spektren detaillierter vorgestellt, wobei einer einen niedrigen, der andere einen hohen Fehler in der Bestimmung der Effektivtemperatur aufwies.

# 4.1 Beobachtungen

### 4.1.1 Beobachtung von R Leo, R CVn und V CVn

Die Beobachtungen wurden im Zeitraum zwischen 1996 und 1999 an der Southeastern Association for Research in Astronomy (SARA) mit dem 0.9 m Teleskop, sowie am Appalachian State University's Dark Sky Observatory (DSO) mit dem 0.45 m Teleskop durch-

	RA	Dec	Spektral-			Periode
Objekt	(J2000.0)	(J2000.0)	Тур	$V_{\rm max}$	$V_{\min}$	(Tage)
R Leo	$09\ 47\ 33$	$+11 \ 25 \ 45$	M8 IIIe	5.8	10.0	309.13
V CVn	$13 \ 19 \ 27$	$+45 \ 31 \ 38$	M6 IIIa	6.8	8.8	188.74
R CVn	$13 \ 48 \ 57$	$+39 \ 32 \ 34$	M6 IIIe	7.7	11.9	328.00

Tabelle 4.1: Position, Spektraltyp, Helligkeitsschwankungen und Periodenlängen von R Leo, V CVn und R CVn (Auszug aus Castelaz *et al.* (2000a, Tabelle 1))

geführt (Castelaz und Luttermoser, 1997; Castelaz *et al.*, 2000a). Es wurden 20 Mira-Veränderliche aufgenommen, von denen in dieser Arbeit nur R Leo, R CVn und V CVn berücksichtigt worden sind, weil von ihnen die meisten Aufnahmen vorlagen und somit eine bessere Phasenauflösung der Helligkeitsvariabilität vorhanden ist (siehe Tabelle 4.1 und 4.2).

Die Spektren umfassen einen Bereich von ca. 6200 - 9000 Å und weisen eine spektrale Auflösung von 2.4 Å auf. Das Verhältnis von Signal zu Rauschen (Signal to Noise, S/N) ist bei diesen Aufnahmen größer als 100. Es scheint bei den reduzierten Spektren einen kleinen Offset des Flusses unbekannter Herkunft und Größe zu geben (Castelaz, persönliche Mitteilung). Als Abschätzung wurde angenommen, daß der Offset 90% des Minimalwertes des gemessenen Flusses beträgt. Der Fluß wurde dann um diesen Offset erniedrigt. Das hat auf den später durchgeführten Vergleich keinen großen Einfluß, weil zum einen der Offset im Prozentbereich des Gesamtflusses liegt und zum anderen die eine Hälfte der Fitparameter durch geglättete Spektren ermittelt werden, bei denen der Offset gänzlich verschwindet, worauf weiter unten eingegangen wird.

#### 4.1.2 Beobachtungen von S Car und RZ Car

S Car und RZ Car sind zwei sauerstoffreiche Mira-Veränderliche, sichtbar im Sternbild Carina auf der Südhemisphäre. Die Aufnahmen wurden zwischen 1995 und 1996 im infraroten Bereich am 2.3 m Teleskop der Australia National University am Siding Spring Observatory bzw. im optischen Bereich am 1.88 m Teleskop am Mount Stromlo erstellt (Lançon und Wood, 2000). Für die Aufnahmen im infraroten Bereich wurde das Cryogenic Array Spektrometer und im optischen der Reynolds Spektrograph verwendet.

Dabei wurden Spektren in den Phasen  $\varphi = 0.0$  bis 0.9 gewonnen, jedoch über mehrere Helligkeitsperioden, wie in Tabelle 4.4 zu sehen ist. Die Spektren beider Objekte sind jeweils aus einem Teilstück im optischen Bereich (ca.  $0.50 - 0.99 \,\mu$ m) und einem im nahen Infrarot ( $0.97 - 2.49 \,\mu$ m) zusammengesetzt worden. Die Auflösung im optischen Bereich wurde mit ca. 30 - 40 Å, entsprechend ca. R = 185 - 250 bei  $\lambda_0 = 0.75 \,\mu$ m angegeben. Die Auflösung im nahen Infrarot beträgt ca.  $R = 1100^1$ . Das typische Verhältnis von Signal zu Rauschen (S/N) wird mit ca. 50 angegegeben, mit Ausnahme von einigen Abschnitten des Spektrums, wo es Reflektionen im Instrument gab und wo Absorptionslinien aus der Erdatmosphäre (tellurische Absorption, meist H<sub>2</sub>O) eine Rolle spielten. Die Bereiche mit

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Laut Lançon und Wood (2000) beträgt die Auflösung  $R = \lambda/\delta\lambda = 1100$ . Die Angabe bei welcher Referenzwellenlänge die Auflösung erreicht wird fehlt allerdings. Vermutlich in der Mitte des IR–Spektrums, also bei  $\lambda_0 \approx 1.73 \,\mu\text{m}$ 

Objekt	Datum	JD-2.45e6	Phase	V
R Leo	1997 Jan 26	475.5	0.16	*
	$1997 \ {\rm Feb} \ 14$	494.5	0.16	8.5
	$1997 { m Mar} 13$	520.5	0.25	9.2
	1997 May 28	596.5	0.49	10.0
	$1998 \ { m Feb} \ 15$	859.5	0.34	9.8
	$1998 { m Mar} 28$	900.5	0.48	10.0
	1998 May 24	957.5	0.66	9.2
	$1998 \ \mathrm{Nov} \ 14$	1131.5	0.23	8.8
	1999 May 29	1325.5	0.80	*
V CVn	1996 Mar 01	144.5	0.18	*
	1996 May 17	221.5	0.60	*
	$1997 \ { m Feb} \ 14$	493.5	0.12	7.0
	$1997 { m Mar} 13$	520.5	0.27	7.9
	$1997 { m May} 25$	593.5	0.65	8.8
	$1998 \ {\rm Feb} \ 15$	859.5	0.06	7.1
	1998 May 23	956.5	0.57	8.8
R CVn	1996 Mar 01	144.5	0.00	*
	$1997 \ Jan \ 26$	475.5	0.00	*
	$1997  { m Feb}  15$	494.5	0.09	8.5
	$1997 { m Mar} 13$	520.5	0.17	9.5
	$1997 { m May} 17$	586.5	0.23	*
	$1997 { m May} 26$	595.5	0.39	11.3
	$1998 \ { m Feb} \ 15$	859.5	0.20	9.9
	1998 May 23	956.5	0.50	11.9

Tabelle 4.2: Beobachtungszeiten, -helligkeiten und Zuordnung zur Phase von R Leo, V CVn und R CVn. (Auszug aus Castelaz *et al.* (2000a, Tabelle 2)) Die mit (\*) markierten Einträge entstammen einer persönlichen Mitteilung von Castelaz.

niedrigem S/N sind markiert worden und umfassen den Überlappungsbereich der optischen und IR–Spektren (ca. 0.97 – 0.99 µm), sowie die Bereiche 1.12 – 1.15, 1.33 – 1.48 und 1.80 – 1.95 µm. Im Anhang sind die phasenaufgelösten Spektren ab Seite 103 abgebildet, wobei nur zwei vom Vergleich ausgesparte Bereiche (1.3 – 1.5 und 1.8 – 1.95 µm) markiert sind. Bei einigen Spektren sind einige deutliche Emissionslinien von Wasserstoff sichtbar, wie z.B. bei 1.4 µm.

# 4.2 Vergleich von Modell- und Sternspektren

Der Vergleich besteht in der Abschätzung, welches Modellspektrum (und somit welche Modellparameter) am besten zu den einzelnen Beobachtungsspektren paßt. Der Vergleich erfolgt mit einfachen statistischen Mitteln und setzt keine weiteren Kenntnisse über einzelne Linienprofile voraus. Aufgrund der niedrigen Auflösung der beobachteten Spektren

	RA	Dec	Spektral-			Periode
Objekt	(J2000.0)	(J2000.0)	Тур	$V_{\rm max}$	$V_{\min}$	(Tage)
S Car	$10 \ 09 \ 22$	$-61 \ 32 \ 56$	K5e - M6e	4.5	9.9	149.5
RZ Car	$10 \ 35 \ 37$	-70 43 03	M4e - $M8e$	8.8	15.0	272.8

Tabelle 4.3: Position, Spektraltyp, Helligkeitsschwankungen und Periodenlängen von S Car und RZ Car (Auszug aus Lançon und Wood (2000), Tabelle 3, S.222.) Die Positionen wurden auf J2000 umgerechnet.

Objekt	Datum	Phase
S Car	1995 Dec	0.0
	1996 May	0.2
	1996 Jan	0.4
	1996 Jul	0.5
	1996 Mar	0.6
	1995 Jun	0.9
RZ Car	1996 May	0.0
	1996 Jul	0.2
	1996 Jan	0.6
	1996 Mar	0.7
	1995 Jun	0.8

Tabelle 4.4: Beobachtungszeiten, -helligkeiten und Zuordnung zur Phase von S Car und RZ Car. (Aus Lançon und Wood (2000, Abb. B7+B8, S. 239f))

ist es zudem unwahrscheinlich, zu einzelnen Linien Aussagen machen zu können.<sup>2</sup>

#### Linearer Korrelationskoeffizient

Als Maß für einen guten Vergleich (Fit) ist der lineare Korrelationskoeffizient r geeignet. Sind  $S_{\lambda} = S(\lambda)$  die Flüsse der synthetischen Spektren und  $O_{\lambda}$  die der beobachteten, dann kann  $O_{\lambda}$  gegen  $S_{\lambda}$  aufgetragen werden. Wenn die Punkte  $(S_{\lambda}, O_{\lambda})$  mit der Wahrscheinlichkeit 1 auf einer Geraden liegen, ist r = 1. Handelte es sich hingegen um reine Zufallsvariablen, ist r = 0. Sind  $S_i$ , bzw.  $O_i$  diskretisierte Spektren mit  $i = 1 \dots n$  und  $S_i = S_{\lambda_i}$ , bzw.  $O_i = O_{\lambda_i}$ , also Vektoren gleicher Dimension, dann ergibt sich der Korrelationskoeffizient wie folgt:<sup>3</sup>

$$r = \frac{\sigma_{OS}}{\sigma_O \sigma_S}$$
$$= \frac{n \sum_i O_i S_i - \sum_i O_i \sum_i S_i}{\sqrt{\left[n \sum_i O_i^2 - (\sum_i O_i)^2\right] \left[n \sum_i S_i^2 - (\sum_i S_i)^2\right]}}$$
(4.1)

 $<sup>^{2}</sup>$ In Castelaz *et al.* (2000a) wird für R Leo, V CVn, R CVn und andere Mira–Veränderliche eine Analyse einiger Linien durchgeführt, was bei den vorliegenden niedrigen Auflösungen recht mutig erscheint.

 $<sup>^{3}</sup>$ beispielsweise nach Bevington und Robinson (1992) und Bronstein und Semendjajew (1997)

Bei einem Korrelationskoeffizienten  $r \to 1$  kann also von einer guten Ähnlichkeit zwischen beiden zu vergleichenden Spektren ausgegangen werden. Dabei müssen beide Spektren die gleiche Anzahl von Datenpunkte und die gleiche Auflösung haben. Die Anzahl der Datenpunkte kann durch lineare Interpolation angeglichen werden. Die Anpassung der Auflösung wurde dadurch erreicht, indem die synthetischen Spektren mit einer Auflösung von 0.1 Å durch eine Faltung einer Gausskurve, die dem Instrumentenprofil entspricht, geglättet wurden.

#### $\chi^2$ –Summe

Ein weiteres Maß für die Qualität eines Vergleichs ist die  $\chi^2$ -Summe, die für diesen Fall durch

$$\chi^2 = \sum_{i} \frac{(O_i - S_i)^2}{S_i} \tag{4.2}$$

berechnet wird. Es ist offensichtlich, daß für identische Spektren  $\chi^2 = 0$  gilt und somit ein möglichst kleiner Wert für  $\chi^2$  als Indiz für eine gute Übereinstimmung zu sehen ist.

#### Filterung im Fourierraum

Die beiden Qualitätsmerkmale für den Vergleich ( $\chi^2$  und r) sollten zum einen mit unmodifizierten Spektren ermittelt werden. Zum anderen sollten einige Anteile aus den Spektren herausgefiltert werden. Dazu gehört beispielsweise der Offset des Flusses in einigen beobachteten Spektren, der eliminiert werden soll. Hochfrequentes Rauschen als Resultat von Messungen bzw. niederfrequente Variationen als Resultat von Kalibrationsfehlern oder ungenauen Modellberechnungen sollen ebenfalls unterdrückt werden. Werden die Spektren  $S_{\lambda}$ , bzw.  $O_{\lambda}$  als Funktion F(x) aufgefasst, so können sie durch diskrete Fourier– Transformation

$$\tilde{F}(\omega) = \frac{1}{n} \sum_{x=0}^{n-1} F(x) \cdot e^{\frac{-2\pi i \omega x}{n}}$$

$$\tag{4.3}$$

in den Fourier- oder Frequenzraum überführt werden. Dabei hat die Fouriertransformierte  $\tilde{F}$  ebenfalls n Elemente, deren Argument  $\omega$  den Bereich von

$$\omega_{-n/2} = -(n_i - 1)/2n_i x_i, \ \dots, \ \omega_0 = 0, \ \dots, \ \omega_{n/2} = (n_i - 1)/2n_i x_i$$

abdeckt. Damit die Spektren eine periodische Funktion ohne großen Sprung darstellen, wurden sie derart linear skaliert, daß  $F(\lambda_0) = F(\lambda_{\max})$ . Dies hat nur einen minimalen Einfluß auf die Fouriertransformierte, da nur die unteren Frequenzen ( $\omega_0, \omega_{|i| \ll n/2}$ ) davon betroffen sein können, die durch die Filterung stark abgeschwächt werden.

Um die Filterung durchzuführen wird die Fouriertransformierte im nieder- und hochfrequenten Bereich folgendermaßen verändert:

$$\ddot{F}_{\text{filt}}(\omega_i) = (1 - f^i)\ddot{F}(\omega_i) \tag{4.4}$$

Die Filterung für den niedrigen Frequenzbereich wurde für  $0 \le |i| < n/8$  mit f = 0.8 und für den hohen Frequenzbereich für  $n/4 > |i| \ge n/2$  mit f = 0.9 durchgeführt. Die übrigen Bereiche  $(n/8 \le |i| \le n/4)$  wurden nicht verändert, da nur hoch- und niederfrequente Anteile gedämpft werden sollten. Es ergibt sich sich eine Filterfunktion, wie sie in Abbildung



Abbildung 4.1: Graphische Darstellung der Filterfunktion  $\tilde{F}_{\rm filt}$ im Fourierraum.



Abbildung 4.2: Darstellung des ungefilterten (oben) und des gefilterten Spektrums (unten) von R Leo. Der Fluß ist in willkürlichen Einheiten angegeben.



Abbildung 4.3: Darstellung des ungefilterten (oben) und des gefilterten Spektrums (unten) von RZ Car. Schraffiert dargestellt sind die Stellen im Spektrum mit einem niedrigen Verhältnis von Signal zu Rauschen. Der Fluß ist in willkürlichen Einheiten angegeben.

4.1 zu sehen ist. Nach der Filterung erfolgte die Rücktransformation der modifizierten Funktion  $\tilde{F}_{\text{filt}}$  durch die inverse Fouriertransformation:

$$F(x) = \sum_{\omega=0}^{n-1} \tilde{F}_{\text{filt}}(\omega) \cdot e^{\frac{2\pi i \omega x}{n}}$$
(4.5)

Die beiden Abbildungen 4.2 und 4.3 zeigen die Spektren von R Leo und RZ Car. Im oberen Bildteil ist das ungefilterte, im unteren Teil das gefilterte Spektrum zu sehen. Es ist zu erkennen, daß besonders großskalige Veränderungen in den Linien wie gewünscht unterdrückt werden, die übrigen Charakteristika der Spektren jedoch erhalten sind.

#### Durchführung

Um beide Spektren miteinander vergleichen zu können mussten sie angepaßt werden. Als erstes wurde die Auflösung der synthetischen Spektren von 0.1 Å an die Auflösung der beobachteten angeglichen. Das wurde, wie bereits erwähnt, durch eine Faltung mit einer entsprechenden Gauß-Kurve durchgeführt. Danach erfolgte eine Interpolation beider Spektren auf ein gleiches und äquidistantes Wellenlängengitter. Abschließend wurden die Spektren auf den gleichen Fluß normiert, weil der Fluß in den beobachteten Spektren nicht absolut, sondern nur relativ kalibriert ist.

In Kapitel 3.4 wurde beschrieben, daß sich die Modellpektren bei einer Modifikation des  $\tau$ -Gitters um bis zu 25% geändert haben. Das bedeutet, daß der numerische Vergleich der

beobachteten Spektren mit den 1040 Modellenspektren bei einem modifiziertem  $\tau$ -Gitter bis zur optischen Tiefe von  $10^{-8}$  oder niedriger andere Ergebnisse liefern könnte. Da aber zum Teil nieder- und hochfrequente Anteile in den Spektren unterdrückt wurden, wozu auch die steilen Linien in den Relativspektren gehören (Abbildung 3.14 auf Seite 46), ist diese Abweichung minimal. Weiterhin tritt der Effekt der optisch zu dicken äußersten Schicht bei niedrigen Temperaturen und hohem log g nicht auf, so daß Ergebnisse in diesem Parameterbereich auf jeden Fall gültig sind.

Bei den Spektren von S Car und RZ Car wurden aufgrund der Bereiche mit niedrigem S/N pro beobachtetes Spektrum fünf Vergleiche in verschiedenen Wellenlängenbereichen durchgeführt. Die Spektren wurden jeweils in den Bereichen  $0.5 \le \lambda \le 1.1$ ,  $0.5 \le \lambda \le 1.3$ ,  $1.5 \le \lambda \le 1.8$ ,  $1.95 \le \lambda \le 2.5 \,\mu$ m und schließlich im gesamten Bereich ( $0.5 \le \lambda \le 2.5 \,\mu$ m) verglichen, um zu sehen, ob Abschnitte mit niedrigem S/N einen Einfluß auf den Vergleich haben.

Für jede Kombination vom gemessenem Spektrum  $O_{\lambda}$  und dem Modellspektrum  $S_{\lambda} = S_{\lambda}(T_{\text{eff}}, \log g, \text{C/O})$  mit den dazugehörigen Parametern  $T_{\text{eff}}$ ,  $\log g$  und C/O wurden vier Parameter ( $\chi^2_{1,2}$  und  $r_{1,2}$ ) bestimmt.  $\chi^2_1$  und  $r_1$  wurden aus den Spektren ohne zusätzliche Filterung und  $\chi^2_2$  und  $r_2$  aus denen mit Filterung im Fourierraum gewonnen. Es wurden dann die Parameter aus den Modellen verwendet, die das kleinste  $\chi^2$ , bzw. größte r hatten. Für jeden der drei Parameter ergaben sich also vier Werte:

$$\begin{array}{cccc} T_{\chi_1^2}, & T_{\chi_2^2}, & T_{r_1}, & T_{r_2}, \\ \log g_{\chi_1^2}, & \log g_{\chi_2^2}, & \log g_{r_1}, & \log g_{r_2}, \\ \mathrm{C/O}_{\chi_1^2}, & \mathrm{C/O}_{\chi_2^2}, & \mathrm{C/O}_{r_1}, & \mathrm{C/O}_{r_2} \end{array}$$

Die passenden Parameter  $T_{\varphi}$ ,  $\log g_{\varphi}$  und C/O $_{\varphi}$  bei einer Phase  $\varphi$  ergaben sich dann aus dem gemittelten Median der Einzelwerte. Die Temperatur  $T_{\varphi}$  wird also durch den gemittelten Median von  $T_{\chi_1^2}$ ,  $T_{\chi_2^2}$ ,  $T_{r_1}$  und  $T_{r_2}$  bestimmt. Die Standardabweichung des Mittelwertes der vier Werte wird als Maß für eine Fehlerbetrachtung verwendet ( $\Delta T_{\varphi}$ ), wobei der systematische Fehler der Effektivtemperatur der Modelle bei ±100 K liegt (Hauschildt, persönliche Mitteilung). Insgesamt wurde mit allen 1040 Modellspektren verglichen.

Es kann nicht erwartet werden, daß sich die Schwerebeschleunigung an der Sternoberfläche durch den Vergleich bestimmen lässt. Die Schwerebeschleunigung hat einen großen Einfluß auf die Breite der Spektrallinien, die aufgrund der niedrigen Auflösung der beobachteten Spektren nicht erkennbar ist. Abbildung 4.4 zeigt die Ergebnisse für einen Fit des Spektrums von R CVn mit der Periodenphase 0.17. Dort sind die vier Fitparameter  $\chi^2_{1,2}$  und  $r_{1,2}$  in Abhängigkeit der Modellarameter  $T_{\text{eff}}$  und log g dargestellt. Der Modellparameter C/O = 0.48 wurde zur besseren Übersicht nicht geändert. Es ist zu sehen, daß die Fitparameter kaum von log g abhängen.

Auf der anderen Seite ist eine Abhängigkeit der Fitparameter vom Kohlenstoff– Sauerstoff–Verhältnis zu erkennen (Abbildung 4.5). Es wird nicht erwartet, daß das C/O– Verhältnis durch diese Methode genau bestimmt werden kann, doch kann eine Veränderung von C/O in Abhängigkeit der Phase zumindest als Indiz dafür gelten, daß sich die Chemie in den Sternatmosphären nicht im Gleichgewicht befindet.

Zu Beginn wurde die Annahme gemacht, daß der Temperaturverlauf in Abhängigkeit der Phase  $\varphi$  innerhalb einer Periode in grober Näherung durch

$$T_{\varphi} = \Delta \overline{T} \cdot \cos(2\pi \cdot \varphi) + \overline{T} \tag{4.6}$$



Abbildung 4.4: Abhängigkeit der Fitparameter  $\chi^2_{1,2}$  und  $r_{1,2}$  von den Modellparametern  $T_{\text{eff}}$  und log g für das Spektrum von R CVn (Phase 0.17). Der Modellparameter C/O wurde zu einer besseren Darstellung festgehalten und beträgt 0.48. Es ist zu erkennen, daß die Fitparameter kaum von log g abhängig sind.

beschrieben werden kann. Es sollte also versucht werden, durch einen Least–Square Fit<sup>4</sup> mit Hilfe der phasenaufgelösten Temperaturwerte die mittlere Temperatur  $\overline{T}$  sowie die Amplitude  $\Delta T$  zu bestimmen. In den Ergebnissen war eine Periodizität jedoch nicht erkennbar, so daß als mittlere Temperatur  $\overline{T}$  der Mittelwert aller Einzelwerte angenommen wurde. Dies ist insofern gerechtfertigt, weil die Einzelwerte mehr als die Hälfte der Periode abdecken. Als Maß für die Temperaturamplitude  $\Delta \overline{T}$  wurde die Standardabweichung der Einzelmessungen angenommen.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>siehe Press und Flannery (1988)



Abbildung 4.5: Abhängigkeit der Fitparameter  $\chi^2_{1,2}$  und  $r_{1,2}$  von den Modellparametern  $T_{\rm eff}$  und C/O für das Spektrum von R CVn (Phase 0.17). Der Modellparameter log g wurde zu einer besseren Darstellung festgehalten und beträgt 0.0. Im Gegensatz zu Abbildung 4.4 ist eine deutliche Abhängigkeit der Fitparameter von C/O erkennbar.

# 4.3 Ergebnisse

Die Fehler der einzelnen Temperaturbestimmungen betrugen, wenn der systematische Fehler der Modelle ( $\pm 100 \,\mathrm{K}$ ) vernachlässigt wird, zwischen  $\pm 25 \,\mathrm{und} \pm 235 \,\mathrm{K}$ . Am Beispiel zweier beobachteten Einzelspektren soll gezeigt werden, wie ein niedriger, bzw. hoher Fehler zustande kam.

Der Fehler für die Temperatur war beim Spektrum von R CVn ( $\varphi = 0.17$ ) mit ±25 K einer der niedrigsten (siehe Tabelle 4.5). In den Abbildungen 4.6 und 4.7 sind die Modellspektren mit  $T_{\rm eff} = 3000$  K, log g = 1.5 und C/O= 0.48, bzw.  $T_{\rm eff} = 3100$  K, log g = 2.5 und C/O= 0.48 im direkten Vergleich mit dem Spektrum von R CVn zu sehen. Auf der rechten Seite sind die dazugehörigen gefilterten Spektren dargestellt. Es sind nur wenige kleine Abweichungen im Vergleich sichtbar, die Spektren passen somit gut zusammen.

Der Vergleich, der bei der Temperaturbestimmung den höchsten Fehler (±235 K) aufwies, wurde beim Vergleich mit R Leo ( $\varphi = 0.23$ ) entdeckt. Der Vergleich mit den Modellen mit  $T_{\rm eff} = 3000$  K, log g = 1.5 und C/O = 0.48, bzw.  $T_{\rm eff} = 2000$  K, log g = 0.0 und C/O = 0.40 mit R Leo ist in den Abbildungen 4.8 und 4.9 gezeigt. Das Spektrum des Modells mit  $T_{\rm eff} = 3000$  K stimmt recht gut mit dem von R Leo überein, wohingegen das

		$T_{\varphi}/\mathrm{K}$	$\log g_{\varphi}$	$C/O_{\varphi}$
R CVn, Phase 0.17	Median:	3000	1.50	0.48
	Fehler:	25		
	$\chi^2$ (ungefiltert)	3000	1.50	0.48
	r (ungefiltert)	3000	1.00	0.48
	$\chi^2$ (gefiltert)	3000	1.50	0.48
	r (gefiltert)	3100	2.50	0.48
R Leo, Phase 0.23	Median:	2900	1.75	0.48
	Fehler:	235		
	$\chi^2$ (ungefiltert)	2900	2.00	0.48
	r (ungefiltert)	3000	1.50	0.48
	$\chi^2$ (gefiltert)	2000	0.00	0.40
	r (gefiltert)	2900	2.00	0.48

Tabelle 4.5: Werte der Fit–Parameter für jeweils einen Vergleich von Spektren von R Leo und R CVn mit den Modellen.

mit 2000 K, das für die gefilterten Spektren den bestmöglichen Wert von  $\chi^2$  geliefert hat, bei der Betrachtung deutliche Unterschiede aufwies. Bei den schlecht zusammenpassenden Spektren handelt es sich um einzelne Ausreißer, die durch Bildung des gemittelten Medians  $T_{\varphi}$  keinen großen Einfluß auf die Temperaturbestimmung haben. Lediglich der Fehler  $\Delta T_{\varphi}$  wird dadurch erhöht.

Bei den Mira–Veränderlichen S Car un RZ Car wurde der Vergleich in verschiedenen Wellenlängenausschnitten der Spektren durchgeführt. Die phasenabhängigen Temperaturen  $T_{\varphi}$  für die verschiedenen Bereiche sind in den Abbildungen 4.10 und 4.11 aufgetragen. An den Abbildungen ist zu erkennen, daß der Vergleich über den gesamten Spektralbereich gute Werte liefert, da sich die übrigen Einzelwerte meist zwischen den anderen bewegen.



Abbildung 4.6: Direkter Vergleich eines Spektrums von R CVn ( $\varphi = 0.17$ ) mit einem Modellspektrum mit  $T_{\text{eff}} = 3000 \text{ K}$ ,  $\log g = 1.5 \text{ und C/O} = 0.48$ . Links: Vergleich der ungefilterten, rechts: Vergleich der gefilterten Spektren.



Abbildung 4.7: Direkter Vergleich eines Spektrums von R CV<br/>n $(\varphi=0.17)$ mit einem Modellspektrum mit  $T_{\rm eff}=3100\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O<br/>=0.48.



Abbildung 4.8: Direkter Vergleich eines Spektrums von R Leo ( $\varphi = 0.23$ ) mit einem Modellspektrum mit  $T_{\rm eff} = 3000$  K,  $\log g = 1.5$  und C/O= 0.48.



Abbildung 4.9: Direkter Vergleich eines Spektrums von R<br/> Leo ( $\varphi=0.23)$ mit einem Modellspektrum mit  $T_{\rm eff}=2000\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O= 0.40.


Abbildung 4.10: Ermittelte phasenabhängige Temperaturen  $T_{\varphi}$  für RZ Car. Die verschiedenen Graphen geben die Temperaturen an, die durch einen Vergleich im jeweilig Spektralbereich bestimmt wurden. Die beobachteten Spektren umfassten einen Gesamtwellenlängenbereich von  $0.5 - 2.5 \,\mu\text{m}$ .

Künftig sollten also kleinere Bereiche mit niedrigem S/N kein Grund sein, den Vergleich nicht über den gesamten Bereich durchzuführen.

#### Übersicht der Ergebnisse

Aus der Verteilung der Temperaturen kann kein Rückschluß auf die Periodizität gezogen werden. Das mag im vorliegendem Fall daran liegen, daß die Spektren zwar phasenaufgelöst aufgenommen wurden, diese aber teilweise aus unterschiedlichen Perioden stammen, die bezogen auf die beobachteten Helligkeit leicht variabel sind. Der Versuch der Temperaturbestimmung sollte in künftigen Arbeiten bei einer deutlich verbesserten Phasenauflösung der Beobachtungen wiederholt werden.

Die über eine gesamte Periode gemittelten bestimmten Effektivtemperaturen  $\overline{T}$ , die aus den Mittelwerten der  $T_{\varphi}$  bestehen, sind als Übersicht in Tabelle 4.6 zu sehen.  $\Delta \overline{T}$ ist die vermutete Temperaturamplitude, die trotz ungenügender Periodizität der Einzeltemperaturen  $T_{\varphi}$  als deren Standardabweichung abgeschätzt wurde. Für R Leo, R CVn und S Car existieren Literaturwerte für die mittlere Effektivtemperatur . Die hier ermittelten Werte stimmen im Bereich von  $\pm 200 \text{ K}$  gut mit ihnen überein. Besonders gelungen scheint die Temperaturbestimmung von S Car zu sein; die Abweichung beträgt weniger als  $\pm 20 \text{ K}$  vom Literaturwert. Die mittleren Effektivtemperaturn stimmen ebenfalls mit den in Abbildung 3.2 gezeigten Daten des Mira–Katalogs (siehe 3.1.3) gut überein. Neben den ermittelten Effektivtemperaturen sind in Tabelle 4.6 ebenfalls die über eine Periode



Abbildung 4.11: Ermittelte phasenabhängige Temperaturen  $T_{\varphi}$  für S Car. Die verschiedenen Graphen geben die Temperaturen an, die durch einen Vergleich im jeweilig Spektralbereich bestimmt wurden. Die beobachteten Spektren umfassten einen Gesamtwellenlängenbereich von  $0.5 - 2.5 \,\mu$ m.

gemittelten Werte des C/O-Verhältnisses  $\overline{C/O}$  zu sehen.

In den Tabellen 4.7 – 4.9 sind als Einzelergebnisse die phasenaufgelösten Werte  $T_{\varphi}$  und  $C/O_{\varphi}$  mit ihren Fehlern  $\Delta T_{\varphi}$  und  $\Delta C/O_{\varphi}$  eingetragen. Dabei beträgt der Fehler in der Temperaturbestimmung  $\Delta T_{\varphi}$  wegen der systematischen Fehler der Modellatmosphären mindestens ±100 K.

Abschließend läßt sich sagen, daß die hier verwendete Methode aufgrund ihrer einfachen Anwendung gut automatisierbar ist und sich bei einem fertigen Modellgitter mit wenig Aufwand gute Abschätzungen der Effektivtemperaturen ergeben. Die grobe Abschätzung der C/O-Verhältnisse zeigt, daß es sich bei allen fünf Objekten um Mira-Veränderliche handelt, die vom S-Typ sind, also mit C/O < 1. Das C/O-Verhältnis ist bei R Leo, R CVn und V CVn annähernd solar. Bei S Car und RZ Car ist C/O kleiner als eins, allerdings sind die Schwankungen recht stark, so daß sich die chemischen Reaktionen in der Atmosphäre vermutlich nicht im Gleichgewicht befinden. Es wäre interessant, die Methode bei einem Vergleich mit hochaufgelösten Spektren innerhalb eines großen Spektralbereichs anzuwenden, um zu sehen, ob der Parameter log g auf diese Weise ebenfalls bestimmbar ist. Künftig sollte untersucht werden, welche Ergebnisse die in Alvarez und Mennessier (1997) beschriebene Methode der Temperaturbestimmung bei Mira-Veränderlichen für die vorliegenden beobachteten Spektren liefern.

Objekt	$\overline{T}/\mathrm{K}$	$\Delta \overline{T}/\mathrm{K}$	$\overline{\mathrm{C}/\mathrm{O}}$	$\Delta \overline{C/O}$	$T_{\rm lit}/K$	$\Delta T_{\rm lit}/K$	Referenz
R Leo	2680	190	0.46	0.04	2740	410	[1]
					2460	_	[2]
R CVn	2990	200	0.51	0.08	2810	640	[1]
V CVn	3390	280	0.50	0.05			
S Car					3325	275	[3]
$-$ 0.5 $<\lambda < 2.5\mu{ m m}$	3340	460	0.52	0.16			
$-$ 0.5 $<\lambda < 1.1\mu{ m m}$	3530	440	0.51	0.14			
$-$ 0.5 $<\lambda < 1.3\mu{ m m}$	3550	390	0.47	0.07			
$-1.5 < \lambda < 1.8\mu{\rm m}$	2930	320	0.78	0.13			
$- 1.95 < \lambda < 2.5 \mu{ m m}$	2630	350	0.54	0.12			
RZ Car							
$-$ 0.5 $<\lambda < 2.5\mu{ m m}$	2480	250	0.62	0.18			
$-$ 0.5 $<\lambda < 1.1\mu{ m m}$	2400	240	0.76	0.11			
$-$ 0.5 $<\lambda < 1.3\mu{ m m}$	2300	260	0.62	0.14			
$-1.5 < \lambda < 1.8 \mu{ m m}$	2680	140	0.54	0.09			
$- 1.95 < \lambda < 2.5 \mu{ m m}$	2540	250	0.53	0.12			

Tabelle 4.6: Mittlere Effektivtemperaturen und Temperaturamplituden von den beobachteten Mira–Veränderlichen und Vergleich mit Literaturwerten, soweit vorhanden. Die mittlere Temperatur  $\overline{T}$  entspricht dem Mittelwert und die Amplitude  $\Delta \overline{T}$  der Standardabweichung der Einzelwerte  $T_{\varphi}$  (s.S. 62). Ebenfalls aufgetragen ist das mittlere C/O–Verhältnis  $\overline{C/O}$  mit der geschätzten Variablität  $\Delta \overline{C/O}$ . [1]: Alvarez und Mennessier (1997), [2]: Tuthill *et al.* (1994), [3]: Shinkawa (1973)

Objekt	Phase	$T_{\varphi}/K$	$\Delta { m T}_{arphi}/{ m K}$	$C/O_{arphi}$	$\Delta {\rm C/O}_{\varphi}$
R Leo	0.11	2550	100	0.40	0.02
	0.16	2700	100	0.48	0.09
	0.23	2900	156	0.48	0.02
	0.25	2700	100	0.48	0.02
	0.34	2900	100	0.48	0.02
	0.48	2600	100	0.44	0.02
	0.49	2300	100	0.40	0.02
	0.66	2650	100	0.48	0.06
	0.80	2850	100	0.48	0.05
R CVn	0.00	3000	100	0.48	0.02
	0.00	3450	100	0.44	0.02
	0.09	2850	100	0.64	0.06
	0.17	3000	100	0.48	0.02
	0.20	2950	100	0.48	0.06
	0.23	2950	100	0.48	0.06
	0.39	2900	100	0.48	0.02
	0.50	2800	100	0.64	0.06
V CVn	0.12	3600	100	0.48	0.02
	0.17	3500	100	0.60	0.09
	0.18	3100	158	0.48	0.02
	0.20	3700	100	0.48	0.02
	0.57	3100	151	0.48	0.02
	0.60	3100	167	0.48	0.02
	0.65	3650	172	0.48	0.06

Tabelle 4.7: Ergebnisse der Vergleiche zur Temperatur- und C/O–Bestimmung für R CVn, R Leo und V CVn.  $T_{\varphi}$  ist der gemittelte Median von  $T_{\chi_1^2}$ ,  $T_{\chi_2^2}$ ,  $T_{r_1}$  und  $T_{r_2}$  und  $\Delta T_{\varphi}$  deren Standardabweichung. Analog ist C/O $_{\varphi}$  der gemittelte Median von C/O $_{\chi_1^2}$ , C/O $_{\chi_2^2}$ , C/O $_{r_1}$  und C/O $_{r_2}$ .

Objekt	Phase	$T_{\varphi}/K$	$\Delta T_{\varphi}/K$	$C/O_{arphi}$	$\Delta { m C} / { m O}_{arphi}$
S Car $0.5 < \lambda < 2.5\mu\mathrm{m}$	0.00	3800	100	0.48	0.02
	0.20	3100	100	0.60	0.09
	0.40	2800	100	0.40	0.08
	0.50	3400	153	0.44	0.02
	0.60	3000	100	0.80	0.08
	0.90	3950	100	0.40	0.02
$1.5 < \lambda < 1.8\mu\mathrm{m}$	0.00	2650	100	0.80	0.04
	0.20	3050	100	0.64	0.09
	0.40	2650	117	0.64	0.07
	0.50	2800	100	0.80	0.07
	0.60	2900	100	0.80	0.08
	0.90	3500	368	1.00	0.09
$0.5 < \lambda < 1.1\mu\mathrm{m}$	0.00	3800	100	0.48	0.02
	0.20	3600	100	0.48	0.02
	0.40	2700	100	0.80	0.02
	0.50	3600	100	0.48	0.02
	0.60	3500	100	0.44	0.08
	0.90	3950	100	0.40	0.02
$0.5 < \lambda < 1.3\mu\mathrm{m}$	0.00	3800	100	0.48	0.02
	0.20	3600	100	0.48	0.02
	0.40	2800	100	0.60	0.09
	0.50	3600	100	0.48	0.02
	0.60	3600	100	0.40	0.02
	0.90	3900	100	0.40	0.02
$1.95 < \lambda < 2.5\mu\mathrm{m}$	0.00	2800	100	0.48	0.11
	0.20	2700	100	0.74	0.12
	0.40	2000	142	0.64	0.09
	0.50	2750	100	0.48	0.02
	0.60	2500	120	0.48	0.07
	0.90	3000	163	0.44	0.02

Tabelle 4.8: Ergebnisse der Vergleiche zur Temperatur- und C/O–Bestimmung für S Car.

Objekt	Phase	$T_{\varphi}/K$	$\Delta T_{arphi}/K$	$C/O_{arphi}$	$\Delta {\rm C}/{\rm O}_{\varphi}$
RZ Car $0.5 < \lambda < 2$	$2.5\mu{ m m}$ 0.00	2300	100	0.80	0.07
	0.20	2300	100	0.40	0.02
	0.60	2500	102	0.80	0.02
	0.70	2900	100	0.60	0.10
	0.80	2400	100	0.48	0.02
$1.5 < \lambda <$	1.8μm 0.00	2800	100	0.48	0.07
	0.20	2550	100	0.48	0.02
	0.60	2750	100	0.64	0.08
	0.70	2800	100	0.64	0.08
	0.80	2500	100	0.48	0.07
$0.5 < \lambda <$	1.1μm 0.00	2500	100	0.80	0.02
	0.20	2150	100	0.64	0.08
	0.60	2500	100	0.80	0.09
	0.70	2700	100	0.90	0.13
	0.80	2150	100	0.64	0.09
$0.5 < \lambda <$	1.3μm 0.00	2300	100	0.64	0.09
	0.20	2100	100	0.64	0.09
	0.60	2350	100	0.80	0.09
	0.70	2700	100	0.40	0.13
	0.80	2050	100	0.60	0.10
$1.95 < \lambda <$	$2.5\mu{\rm m}$ 0.00	2700	100	0.74	0.14
	0.20	2350	156	0.48	0.07
	0.60	2700	100	0.48	0.02
	0.70	2750	100	0.48	0.02
	0.80	2200	152	0.48	0.02

Tabelle 4.9: Ergebnisse der Vergleiche zur Temperatur- und C/O–Bestimmung für RZ Car.

## Kapitel 5

# Fazit und Ausblick

In Kapitel 3 wurde gezeigt, wie ein umfassendes Modell<br/>gitter von 1040 Modellen erstellt wurde, dessen Parameterbereich den Bereich der Mira–Veränderlichen mehr als ausreichend abdeckt. Die Schrittweite der Parameter  $T_{\rm eff}$  und log g ist im Rahmen der Modell-genauigkeit ausreichend klein gewählt worden und entspricht den Fehlern von stellaren Größen in der Literatur und den systematischen Fehlern der Modelle.

Da sich die Spektren von beobachteten Objekten je nach C/O–Verhältnis stark voneinander unterscheiden, wurde dieses Verhältnis in den in dieser Arbeit durchgeführten Modellrechnungen berücksichtigt.

Aufgrund der chemischen Eigenschaften des Kohlenmonoxids hat eine Änderung der Kohlenstoff- und Sauerstoffhäufigkeiten in Sternatmosphären einen großen Einfluß auf deren Struktur und die Spektren, weshalb dieser Einfluß in den Modellrechnungen untersucht wurde (Abschnitt 3.3). Da sich die Veränderlichkeit der Spektren in Abhängigkeit vom C/O–Verhältnis hauptsächlich bei C/O  $\approx 1.0$  deutlich bemerkbar macht, ist eine Häufigkeitsanalyse beider Elemente durch einen einfachen Vergleich der Spektren, wie er in dieser Arbeit durchgeführt wurde, nur begrenzt möglich. Trotzdem wäre ein Test mit dem Spektrum eines Sterns, deren Effektivtemperatur, Schwerebeschleunigung, Masse und chemische Häufigkeiten bekannt sind, gerade im Hinblick auf die Eindeutigkeit des Ergebnisses interessant. Es ist durchaus möglich, daß bei verschiedenen Metallizitäten und Schwerebeschleunigungen gleiche Spektren berechnet werden.

In zukünftigen Rechnungen von M-Riesen sollte das optische Tiefengitter von  $\tau = 10^2$ bis  $10^{-9}$  reichen, um zu verhindern, daß die äußerste Schicht der Modellatmosphären optisch zu dick ist und das Spektrum verfälscht wird (Abschnitt 3.4). Vermutlich kann in Modellrechnungen das Verhältnis des Planckschen- ( $\overline{\kappa}_b$ ) zum Absorptions-Mittel ( $\overline{\kappa}_j$ ) als Indikator benutzt werden, ob das der Fall ist. Bei  $\overline{\kappa}_b/\overline{\kappa}_j > 1$  wären die Modelle in dieser Hinsicht gültig, andernfalls muß die optische Tiefe der äußeren Atmosphärenschicht erniedrigt werden.

Die Annahme des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts für die Modelle ist eine gute Näherung, wenn niedrig aufgelöste Spektren beobachtet werden (Abschnitt 3.5). Bei höheren Auflösungen sind jedoch bei einigen Atomlinien große Abweichungen vom LTE zu sehen. Weiterhin wäre eine Ausweitung der NLTE–Rechnungen auf alle Ionisationsstufen interessant, ebenso wie die Behandlung von Molekülen.

In Kapitel 4 wurde beschrieben, wie die phasenaufgelösten beobachteten Spektren von R Leo, V CVn, R CVn, S Car und RZ Car mit den Spektren der berechneten Modelle verglichen wurden, um die stellaren Größen  $T_{\text{eff}}$ , log g und C/O zu bestimmen. Als Maß für die Qualtität des Vergleichs wurden der Korrelationskoeffizent r und die  $\chi^2$ -Summe verwendet.

Verglichen wurden zum einem unveränderte Spektren, sowie Spektren, bei denen hochfrequentes Rauschen und niederfrequente Variationen im Spektrumsverlauf gedämpft wurden (Abschnitt 4.2). Zu jeder zu bestimmenden Größe wurden somit vier Parameter  $r_{1,2}$ und  $\chi_{1,2}$  durch den Vergleich erhalten, aus denen durch Bildung des gemittelten Medians die Größen  $T_{\varphi}$ ,  $\log g_{\varphi}$  und C/O<sub> $\varphi$ </sub> bestimmt wurden.

Aufgrund der niedrigen Auflösung der beobachteten Spektren war  $\log g_{\varphi}$  nicht zu ermitteln. Eine deutliche Veränderung der bestimmten C/O-Verhältnisse dient als Indiz dafür, daß sich die Chemie in der Sternatmosphäre nicht im Gleichgewicht befindet. Bei S Car und RZ Car scheint dies der Fall zu sein; das bestimmte C/O-Verhältnis schwankt je nach Phase zwischen 0.40 und 1.0 (Abschnitt 4.3).

Es wurde erwartet, daß die bestimmten Temperaturen eine deutliche Oszillation mit der Änderung der Pulsationsphase des Sterns aufweisen, was vermutlich aufgrund der geringen Anzahl der beobachteten Spektren nicht zu erkennen war. Somit wurden lediglich mittlere Effektivtemperaturen bestimmt, die über eine Periode gemittelt sind. Je nach Objekt liegen sie zwischen 2480 und 3390 K, was gut mit den Werten aus dem Mira-Katalog (Alvarez und Mennessier, 1997) übereinstimmt.

Der direkte Vergleich zwischen Modellspektren und beobachteten Daten zur Bestimmung fundamentaler stellarer Größen liefert bei vorhandenen Modellspektren eine gut automatisierbare Methode. Außer der Auflösung der Spektren und der Phase der Beobachtungen sind lediglich die Spektren notwendig, um diese Größen abzuschätzen.

In zukünftigen Arbeiten kann bei erneuten Beobachtungen von Mira–Veränderlichen die spektrale Auflösung der Beobachtungen derart erhöht werden, daß einzelne Linien gut aufgelöst werden. Vermutlich wird es auf diese Weise gelingen, eine Abschätzung für  $\log g$  zu erhalten. Durch eine Erhöhung der Anzahl der Beobachtungen pro Pulsationsperiode kann die Phasenauflösung verbessert werden. Vermutlich kann bei einer ausreichend guten Phasenauflösung die Periodizität der zu bestimmenden Größen bestätigt werden.

# Anhang A

# Ergänzende Grundlagen

In diesem Anhang sind einige kurze Ergänzungen der Grundlagen enthalten, wie die Übersicht über die Einsteinkoeffizienten und -relationen, die Koeffizienten der Stoßraten und die Nomenklatur der TiO-Übergänge.

### A.1 Einsteinkoeffizienten und -relationen

#### Einsteinkoeffizienten

Spontane Emission:

$$A_{ji} = Übergangswahrscheinlichkeit für spontane Abregung vomZustand j zum Zustand i pro Zeiteinheit (A.1)Mittlere Lebensdauer  $\Delta t = 1/A_{ji}$$$

Strahlungsanregung:

$$B_{ij}\overline{J_{\nu_0}^{\chi}} = \text{Zahl der Anregungen von } i \to j$$
(A.2)  
pro Zeiteinheit für ein Teilchen im Zustand i.

Induzierte Abregung:

$$B_{ji}J^{\eta}_{\nu_0} =$$
 Zahl der induzierten Abregungen von  $j \to i$  (A.3)  
pro Zeiteinheit für ein Teilchen im Zustand j.

Dabei ist  $\overline{J}_{\nu_0}^s = \int J_{\nu} s(\nu - \nu_0) d\nu$ ,  $s = \chi_{\nu}$ ,  $\eta_{\nu}$  das Strahlungsfeld, das mit dem Extinktionsprofil  $\chi$  bzw. Emissionsprofil  $\eta$  über alle Frequenzen gemittelt wird.

#### Einsteinrelationen

Es gelten die Einsteinrelationen

$$\frac{B_{ij}}{B_{ji}} = \frac{g_j}{g_i} \tag{A.4}$$

$$\frac{A_{ji}}{B_{ji}} = \frac{2h\nu^3}{c^2}.$$
(A.5)

#### Planckfunktion

Die Planckfunktion läßt sich durch Einsteinkoeffizienten ausdrücken:

$$\left[S_{\nu}^{l}\right]_{\text{LTE}} = \frac{2h\nu^{3}}{c^{2}} \frac{1}{\left[\frac{B_{ij}n_{i}}{B_{ji}n_{j}}\right]_{\text{LTE}} - 1}$$
(A.6)

#### A.2 Koeffizienten der Stoßraten

Die Rate der An- und Abregung durch Stöße ist proportional zur Teilchenzahl $n_i$ im Ausgangszustandi.

$$C_{ij}$$
 = Zahl der Stoßanregungen von  $i \to j$  (A.7)  
pro Zeiteinheit und pro Teilchen im Zustand i.

$$C_{ji} =$$
Zahl der Stoßabregungen von  $j \to i$  (A.8)

pro Zeiteinheit und pro Teilchen im Zustand j.

Es gilt die Relation

$$\frac{C_{ji}}{C_{ij}} = \frac{g_i}{g_j} e^{\frac{E_{ij}}{kT}}.$$
(A.9)

 $E_{ij}$  ist die Energie für den Übergang  $i \to j$ .

### A.3 Nomenklatur der TiO-Übergänge

Abb. A.1 zeigt einen Teil der elektronischen Zustände von TiO jeweils in den untersten Quantenzahlen bezüglich Rotation und Vibration. Dabei bezeichnet X den Grundzustand. Großbuchstaben bezeichnen Tripletzustände (also A, B, C, D, E, X) und Kleinbuchstaben Singletzustände (a, b, c, d, f, g, h). Die wichtigsten Banden, also Übergänge zwischen den Zuständen, sind  $\alpha$  ( $C \leftarrow X$ ),  $\beta$  ( $c \leftarrow a$ ),  $\gamma$  ( $A \leftarrow X$ ),  $\gamma'$  ( $B \leftarrow X$ ),  $\delta$  ( $b \leftarrow a$ ) und  $\varepsilon$  ( $E \leftarrow X$ ).

Die Übergänge zwischen Vibrationszuständen werden mit  $\Delta v$  bzw. den Vibrationsquantenzahlen bezeichnet. Z.B. 2 – 3 oder  $\Delta v = 0$ . (Schwenke, 1998)



Abbildung A.1: Die linke Abbildung zeigt die elektronischen Zustände von TiO mit den jeweils niedrigsten Quantenzahlen für Rotation und Vibration (Schwenke, 1998). "X" bezeichnet den elektronischen Grundzustand. Die rechte Abbildung zeigt für die entsprechenden elektronischen Zustände die berechneten Energien unter Berücksichtigung von Rotation und Vibration. Zu jedem elektronischen Zustand sind 20 Vibrationszustände zugeordnet.

## Anhang B

# Spektren und Modelle

In diesem Anhang sind alle w/C- und w/O-Verbindungen, die Atmosphärenstruktur und Spektren von 18 ausgewählten Modellen, die phasenaufgelösten beobachteten Spektren von R Leo, R CVn, V CVn, RZ Car und S Car und deren phasenaufgelöste bestimmte Effektivtemperatur und das C/O-Verhältnis.

### B.1 Abhängigkeit der Modellgrößen von der Masse des Modellsterns

Es wurden drei Modelle mit  $T_{\text{eff}} = 3200 \text{ K}$ ,  $\log g = 0.0$ , C/O = 0.48 und jeweils M = 0.5, 1.0, 5.0  $M_{\odot}$  erstellt. In den Abbildungen B.1 – B.2 sind die relativen Gasdrücke, Effektivtemperaturen und Radien relativ zum Modell mit  $M = 1.0 M_{\odot}$  in Abhängigkeit der optischen Tiefe zu sehen.

Das Modell mit  $M = 0.5 M_{\odot}$  weicht beim Gasdruck und der Effektivtemperatur um bis zu -12% und beim Radius um ca. -30% von den Größen des Modells mit  $M = 1.0 M_{\odot}$  ab. Die Abweichung relativ zu diesem Modell beträgt bei dem Modell mit  $M = 5.0 M_{\odot}$  ca. +15% bei dem Gasdruck und der Effektivtemperatur, sowie um bis zu 130% bei dem Radius der Atmosphäre.



Abbildung B.1: Relativer Gasdruck ( $P_{\text{gas},0.5M_{\odot}}/P_{\text{gas},1.0M_{\odot}} - 1.0$ ), relative Effektiv<br/>temperatur ( $T_{\text{eff},0.5M_{\odot}}/T_{\text{eff},1.0M_{\odot}} - 1.0$ ) und relativer Radius ( $R_{0.5M_{\odot}}/P_{1.0M_{\odot}} - 1.0$ ) eines Modells mit  $M = 0.5 M_{\odot}$  bezogen auf eines mit  $M = 1.0 M_{\odot}$ . ( $T_{\text{eff}} = 3200 \text{ K}$ , log g = 0.0, C/O = 0.48)



Abbildung B.2: Relativer Gasdruck ( $P_{\text{gas},5.0M_{\odot}}/P_{\text{gas},1.0M_{\odot}} - 1.0$ ), relative Effektiv<br/>temperatur ( $T_{\text{eff},5.0M_{\odot}}/T_{\text{eff},1.0M_{\odot}} - 1.0$ ), und relativer Radius ( $R_{5.0M_{\odot}}/R_{1.0M_{\odot}} - 1.0$ ) eines Modells mit  $M = 5.0 \ M_{\odot}$  bezogen auf eines mit  $M = 1.0 \ M_{\odot}$ . ( $T_{\text{eff}} = 3200 \ \text{K}$ ,  $\log g = 0.0$ , C/O = 0.48)

### B.2 Übersicht der w/C- und w/O-Verbindungen

Die Nomenklatur w/C- und w/O-Verbindungen wird in Abschnitt 3.3 auf Seite 33 erklärt.

O O<sup>-</sup> O<sup>+</sup> O<sup>++</sup> O<sup>3+</sup> O<sup>4+</sup> OH TiO H<sub>2</sub>O NO O<sub>2</sub> ZrO VO SiO AlO BO CrO LaO MgO ScO YO CaOH LiOH AlOF NaOH MgOH AlO<sub>2</sub> Al<sub>2</sub>O AlOH SiO<sub>2</sub> KOH TiO<sub>2</sub> TiOCl VO<sub>2</sub> YO<sub>2</sub> ZrO<sub>2</sub> BaOH LaO2 AlOCl FeO LiOCl SO CaO BaO BeO MnO NaO NbO NiO PO SrO OCl CuO OF AlBO<sub>2</sub> AlOF<sub>2</sub> AlO<sub>2</sub>H Al<sub>2</sub>O<sub>2</sub> BeBO<sub>2</sub> OBF HBO HBO<sub>2</sub> BO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> BO<sub>3</sub>H<sub>3</sub> KBO<sub>2</sub> LiBO<sub>2</sub> NaBO<sub>2</sub> BO<sub>2</sub> BaO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> BeOH BeO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> Be<sub>2</sub>O Be<sub>3</sub>O<sub>3</sub> CaO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> TiOCl<sub>2</sub> CrO<sub>2</sub> TiOF N<sub>2</sub>O NHO<sub>3</sub> FeO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> SrOH K<sub>2</sub>O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> Li<sub>2</sub>O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> MgO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> Na<sub>2</sub>O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> SrO<sub>2</sub>H<sub>2</sub> PO<sub>2</sub> SO<sub>2</sub> ClOH ClO<sub>2</sub> OHF HO<sub>2</sub> NOH O<sub>3</sub> S<sub>2</sub>O O<sub>2</sub>H<sub>2</sub> NO<sub>2</sub>H SO<sub>3</sub> LiNaO CrO<sub>3</sub> NO<sub>2</sub> NO<sub>3</sub> CsOH

 $\mathsf{OH}^- \ \mathsf{FeO}^- \ \mathsf{BO}^- \ \mathsf{AlOF}_2^- \ \mathsf{NO}^+ \ \mathsf{TiO}^+ \ \mathsf{ZrO}^+ \ \mathsf{AlOH}^+ \ \mathsf{BaOH}^+ \ \mathsf{CaOH}^+ \ \mathsf{Al}_2\mathsf{O}^+ \ \mathsf{SrOH}^+ \ \mathsf{H}_3\mathsf{O}^+$ 

 $\begin{array}{l} H_2 O/1 \ \mbox{BeO/1 NbO/1 OSr/1 OV/1 } O_2 Si/1 \ \mbox{Li}_2 O/1 \ \mbox{Cu}_2 O/1 \ \mbox{Cr}_2 O_3/1 \ \mbox{BLi}_2/1 \\ Al_2 O_3/1 \ \ O_3 V_2/1 \ \ \mbox{Nb}_2 O_5/1 \ \ \mbox{B}_4 K_2 O_7/1 \ \ \mbox{B}_4 Na_2 O_7/1 \ \ \mbox{Li}_2 O_3 Si/1 \ \ \mbox{B}_4 Li_2 O_7/1 \ \ \mbox{Mg}_3 O_8 P_2/1 \\ H_{10} O_8 S/1 \ \ \mbox{B}_8 K_2 O_{13}/1 \end{array}$ 

 $\begin{array}{l} Mg0/c\ Ca0/c\ Ti0/c\ V0/c\ Cu0/c\ Fe0/c\ Ti0_2/c\ Zr0_2/c\ Si0_2/c\ Ti_20_3/c\\ Ti_30_5/c\ Ti_40_7/c\ V_20_3/c\ Al_20_3/c\ Al_20_3/c1\ Al_20_3/c2\ Al_20_3/c3\ Cr_20_3/c\\ CaSi0_3/c\ MgTi0_3/c\ MgSi0_3/c\ CaSi0_3/c\ MnSi0_3/c\ Na_2Si0_3/c\ K_2Si0_3/c\\ Fe_2Si0_4/c\ Ca_2Si0_4/c\ Mg_2Si0_4/c\ ZrSi0_4/c\ Fe_20_3/c\ Fe_30_4/c\ MgAl_20_4/c\\ MgTi_20_5/c\ Al_2Si0_5/c\ CaMgSi_20_6/c\ Ca_2MgSi_20_7/c\ Ca_2Al_2Si0_7/c\ CaAl_2Si_20_8/c\\ KAlSi_30_8/c\ NaAlSi_30_8/c\ Al_6Si_20_{13}/c\ LiAl0_2/c\ H_20/c\\ \end{array}$ 

Liste B.1: Übersicht über die sog. w/0-Verbindungen, also Verbindungen, die von PHOENIX berücksichtigt werden und die Sauerstoff, aber keinen Kohlenstoff enthalten. Sauerstoff in neutraler und ionisierter Form ist ebenfalls berücksichtigt.

C C<sup>-</sup> C<sup>+</sup> C<sup>++</sup> C<sup>3+</sup> C<sup>4+</sup> CH C<sub>2</sub> CN HCN C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> CH<sub>4</sub> CH<sub>2</sub> C<sub>2</sub>H C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> C<sub>3</sub> SiC<sub>2</sub> CH<sub>3</sub> C<sub>3</sub>H C<sub>2</sub>N<sub>2</sub> C<sub>2</sub>N Si<sub>2</sub>C CS<sub>2</sub> CS SiC AlC CP BC CNCl CHCl CHF CHP CH3Cl KCN NaCN BeC<sub>2</sub> C<sub>2</sub>HCl C<sub>2</sub>HF Na<sub>2</sub>C<sub>2</sub>N<sub>2</sub>

 $\mathrm{CH^-}~\mathrm{C_2^-}~\mathrm{CN^-}~\mathrm{CS^-}$ 

 $CH_4/a$ 

C/c TiC/c SiC/c SiC/c1 ZrC/c MgC\_2/c Cr\_3C\_2/c Mg\_2C\_3/c Al\_4C\_3/c Cr\_7C\_3/c Cr\_{23}C\_6/c

Liste B.2: Übersicht über die sog. w/C-Verbindungen, also Verbindungen, die von PHOENIX berücksichtigt werden und die Kohlenstoff, aber kein Sauerstoff enthalten. Kohlenstoff in neutraler und ionisierter Form ist ebenfalls berücksichtigt.

### B.3 Übersicht über die Partialdrücke ausgewählter Modelle

Von insgesamt 1040 gerechneten Modellen wurden 18 mit den Parametern  $T_{\rm eff} = 2200, 3200, 4200$  K, log g = 0.0, 2.5 und C/O = 0.4, 0.8, 1.2 genauer untersucht. Von diesen sind in den Abbildungen B.3 - B.20 jeweils die Gesamt- und Partialdrücke ausgewählter Verbindungen und die dazugehörigen Spektren abgebildet.



Abbildung B.3: Modell<br/>größen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parameter<br/>n $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=0.0$ und C/O = 0.4.



Abbildung B.4: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O = 0.4.



Abbildung B.5: Modell<br/>größen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parameter<br/>n $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=0.0$ und C/O = 0.4.



Abbildung B.6: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O = 0.4.



Abbildung B.7: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 0.4.



Abbildung B.8: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O = 0.4.



Abbildung B.9: Modell<br/>größen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parameter<br/>n $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=0.0$ und C/O = 0.8.



Abbildung B.10: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=2.5$ und C/O=0.8.



Abbildung B.11: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 0.8.



Abbildung B.12: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O = 0.8.



Abbildung B.13: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 0.8.



Abbildung B.14: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=2.5$  und C/O = 0.8.



Abbildung B.15: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 1.2.



Abbildung B.16: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=2200\,{\rm K},\,\log g=2.5$ und C/O = 1.2.



Abbildung B.17: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 1.2.



Abbildung B.18: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=3200\,{\rm K},\,\log g=2.5$ und C/O = 1.2.



Abbildung B.19: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=0.0$  und C/O = 1.2.



Abbildung B.20: Modellgrößen, Partialdrücke und Spektrum des Modells mit den Parametern  $T_{\rm eff}=4200\,{\rm K},\,\log g=2.5$ und C/O = 1.2.

## B.4 Übersicht über die phasenaufgelösten Spektren

Die Abbildungen B.21 - B.25 zeigen die phasenaufgelösten Spektren der beobachteten Mira–Veränderlichen, die im Kapitel 4 zum Vergleich mit den Modellspektren verwendet wurden. Sie entstammen Castelaz *et al.* (2000a) sowie Lançon und Wood (2000).


Abbildung B.21: Übersicht der phasenaufgelösten Spektren von R<br/> CVn. Aus Castelaz $et\ al.$  (2000a).



Abbildung B.22: Übersicht der phasenaufgelösten Spektren von R<br/> Leo. Aus Castelaz $et\ al.$  (2000a).



Abbildung B.23: Übersicht der phasenaufgelösten Spektren von V CVn. Aus Castelaz *et al.* (2000a).



Abbildung B.24: Übersicht der phasenaufgelösten Spektren von RZ Car. Aus Lançon und Wood (2000). Die schraffierten Gebiete bezeichnen Stellen mit niedrigem Signal-zu-Rausch Verhältnis.



Abbildung B.25: Übersicht der phasenaufgelösten Spektren von S Car. Aus Lançon und Wood (2000). Die schraffierten Gebiete bezeichnen Stellen mit niedrigem Signal-zu-Rausch Verhältnis.

# B.5 Übersicht der Temperaturbestimmung anhand der Spektren

Die Abbildungen B.26 - B.37 zeigen die ermittelten Temperaturen in Abhängigkeit der Phase. Wie im Kapitel 4 bereits erwähnt wurde, konnte keine Bestimmung von  $\log g$  erfolgen, so daß keine Leuchtkraftbestimmung durchgeführt werden konnte.



Abbildung B.26: Effektivtemperatur von R CVn in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar.



Abbildung B.27: Effektivtemperatur von R Leo in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar.



Abbildung B.28: Effektivtemperatur von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.5 - 1.8 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.29: Effektivtemperatur von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.1 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.30: Effektivtemperatur von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.3 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.31: Effektivtemperatur von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.95 - 2.5 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.32: Effektivtemperatur von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde der gesamte verfügbare Spektralbereich  $(0.5 - 2.5 \,\mu\text{m})$  berücksichtigt.



Abbildung B.33: Effektivtemperatur von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.5 - 1.8 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.34: Effektivtemperatur von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.1 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.35: Effektivtemperatur von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.3 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.36: Effektivtemperatur von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.95 - 2.5 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.37: Effektivtemperatur von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt die mittlere Temperatur dar. Zur Bestimmung wurde der gesamte verfügbare Spektralbereich  $(0.5-2.5\,\mu\mathrm{m})$  berücksichtigt.

### B.6 Übersicht der Bestimmung von C/O anhand der Spektren

Die Abbildungen B.38 - B.49 zeigen die ermittelten C/O–Verhältnisse in Abhängigkeit der Phase. Wie im Kapitel 4 bereits erwähnt wurde, sind die Werte statt einer quantitativen Analyse eher als Indiz für Abweichungen von der Gleichgewichtschemie aufgrund von durchlaufenden Schockwellen durch die Mira–Variablen zu betrachten.



Abbildung B.38: C/O–Verhältnis von R CVn in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar.



Abbildung B.39: C/O–Verhältnis von R<br/> Leo in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittler<br/>e $\rm C/O–Verhältnis$ dar.



Abbildung B.40: C/O–Verhältnis von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.5 - 1.8 \,\mu\text{m}$  berücksichtigt.



Abbildung B.41: C/O–Verhältnis von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.1 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.42: C/O–Verhältnis von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.3 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.43: C/O–Verhältnis von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.95 - 2.5 \,\mu\text{m}$  berücksichtigt.



Abbildung B.44: C/O–Verhältnis von RZ Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde der gesamte verfügbare Spektralbereich  $(0.5 - 2.5 \,\mu\text{m})$  berücksichtigt.



Abbildung B.45: C/O–Verhältnis von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.5 - 1.8 \,\mu\text{m}$  berücksichtigt.



Abbildung B.46: C/O–Verhältnis von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.1 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.47: C/O–Verhältnis von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $0.5 - 1.3 \,\mu$ m berücksichtigt.



Abbildung B.48: C/O–Verhältnis von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde ausschließlich der Spektralbereich von  $1.95 - 2.5 \,\mu\text{m}$  berücksichtigt.



Abbildung B.49: C/O–Verhältnis von S Car in Abhängigkeit der Phase. Die gestrichelte Linie stellt das mittlere C/O–Verhältnis dar. Zur Bestimmung wurde der gesamte verfügbare Spektralbereich ( $0.5 - 2.5 \,\mu$ m) berücksichtigt.

## Literaturverzeichnis

- Allard, F. und Hauschildt, P. H., Model atmospheres for M (sub)dwarf stars. 1: The base model grid, Astrophysical Journal 445, 433–450 (1995).
- Allard, F., Hauschildt, P. H., Alexander, D. R., und Starrfield, S., Model Atmospheres of Very Low Mass Stars and Brown Dwarfs, Annual Review of Astronomy and Astrophysics 35, 137–177 (1997).
- Allard, F., Hauschildt, P. H., Alexander, D. R., Tamanai, A., und Schweitzer, A., The Limiting Effects of Dust in Brown Dwarf Model Atmospheres, Astrophysical Journal 556, 357–372 (2001).
- Allard, F., Hauschildt, P. H., Miller, S., und Tennyson, J., The influence of H2O line blanketing on the spectra of cool dwarf stars, Astrophysical Journal Letters 426, L39– L41 (1994).
- Allard, F., Hauschildt, P. H., und Schweitzer, A., Spherically Symmetric Model Atmospheres for Low-Mass Pre-Main-Sequence Stars with Effective Temperatures between 2000 and 6800 K, Astrophysical Journal 539, 366–371 (2000a).
- Allard, F., Hauschildt, P. H., und Schwenke, D., TiO and H<sub>2</sub>O Absorption Lines in Cool Stellar Atmospheres, Astrophysical Journal 540, 1005–1015 (2000b).
- Allende Prieto, C., An automated system to classify stellar spectra I, Monthly Notice of the Royal Astronomical Society 339, 1111–1116 (2003).
- Allende Prieto, C. und Lambert, D. L., Fundamental parameters of nearby stars from the comparison with evolutionary calculations: masses, radii and effective temperatures, Astronomy and Astrophysics 352, 555–562 (1999).
- Alvarez, R., Jorissen, A., Plez, B., Gillet, D., und Fokin, A., Envelope tomography of longperiod variable stars. I. The Schwarzschild mechanism and the Balmer emission lines, Astronomy and Astrophysics 362, 655–665 (2000a).
- Alvarez, R., Jorissen, A., Plez, B., Gillet, D., Fokin, A., und Dedecker, M., Envelope tomography of long-period variable stars II. Method, Astronomy and Astrophysics 379, 288–304 (2001a).
- Alvarez, R., Jorissen, A., Plez, B., Gillet, D., Fokin, A., und Dedecker, M., Envelope tomography of long-period variable stars III. Line-doubling frequency among Mira stars, Astronomy and Astrophysics 379, 305–322 (2001b).

- Alvarez, R., Lançon, A., Plez, B., und Wood, P. R., Optical and near-infrared spectrophotometric properties of Long Period Variables and other luminous red stars, Astronomy and Astrophysics 353, 322–334 (2000b).
- Alvarez, R. und Mennessier, M.-O., Determination of Miras temperatures from TiO and VO bands. Estimates of distances., Astronomy and Astrophysics 317, 761–768 (1997).
- Auer, L. H. und Mihalas, D., Non-Lte Model Atmospheres. III. a Complete-Linearization Method, Astrophysical Journal 158, 641–655 (1969).
- Auer, L. H. und Mihalas, D., Non-Lte Model Atmospheres. IV. Results for Multi-Line Computations, Astrophysical Journal 160, 233–243 (1970).
- Aufdenberg, J. P. (2002), Stellar Spectroscopy, pages 15–43, Encyclopedia of Physical Science and Technology, Third Edition, p.15-43 Academic Press, 2002.
- Baraffe, I., Chabrier, G., Allard, F., und Hauschildt, P. H., New Evolutionary Tracks for Very Low Mass Stars, Astrophysical Journal Letters 446, L35–L38 (1995).
- Barman, T. S., Hauschildt, P. H., Schweitzer, A., Stancil, P. C., Baron, E., und Allard, F., Non-LTE Effects of Na I in the Atmosphere of HD 209458b, Astrophysical Journal Letters 569, L51–L54 (2002).
- Baron, E. und Hauschildt, P. H., Parallel Implementation of the PHOENIX Generalized Stellar Atmosphere Program. II. Wavelength Parallelization, Astrophysical Journal 495, 370–376 (1998).
- Barthes, D. und Tuchman, Y., Confrontation between power spectra of Mira stars and theoretical models, Astronomy and Astrophysics 289, 429–440 (1994).
- Baschek, B., Scholz, M., und Wehrse, R., The parameters R and Teff in stellar models and observations, Astronomy and Astrophysics 246, 374–382 (1991).
- Bertelli, G., Bressan, A., Chiosi, C., Fagotto, F., und Nasi, E., Theoretical isochrones from models with new radiative opacities, Astronomy and Astrophysics Supplement 106, 275– 302 (1994).
- Bessell, M. S., Scholz, M., und Wood, P. R., Phase and cycle dependence of the photospheric structure and observable properties of Mira variables., Astronomy and Astrophysics 307, 481–499 (1996).
- Bevington, P. R. und Robinson, D. K. (1992), *Data reduction and error analysis for the physical sciences*, The MacGraw-Hill Companies, Inc., 2nd edition.
- Biermann, L., Untersuchungen über den inneren Aufbau der Sterne, IV. Konvektionszonen im Inneren der Sterne, Veroeffentlichungen der Universitaets-Sternwarte zu Goettingen 2, 220–243 (1932).
- Bronstein, I. N. und Semendjajew, K. A. (1997), *Taschenbuch der Mathematik*, Harri Deutsch, Thun; Frankfurt am Main, 3. edition.

- Buchholz, B., Hauschildt, P. H., Rammacher, W., und Ulmschneider, P., An operator splitting method for atmospheres with shocks, Astronomy and Astrophysics 285, 987– 994 (1994).
- Carbon, D. F. und Gingerich, O. (1969), The Grid of Model Stellar Atmospheres from 4000 to 10,000 K, in Proceedings of the 3rd Harvard-Smithsonian Conference on Stellar Atmospheres, Cambridge, Mass.: Massachusetts Institute of Technology (MIT), 1969, edited by Gingerich, Owen, p.377, page 377 ff.
- Carroll, B. W. und Ostlie, D. A. (1996), An introduction to modern astrophysics, Addison Wesley Publishing Company, 1st edition.
- Castelaz, M. W. und Luttermoser, D. G., Spectroscopy of Mira Variables at Different Phases., Astronomical Journal 114, 1584–1591 (1997).
- Castelaz, M. W., Luttermoser, D. G., Caton, D. B., und Piontek, R. A., Phase-dependent Spectroscopy of Mira Variable Stars, Astronomical Journal 120, 2627–2637 (2000a).
- Castelaz, M. W., Luttermoser, D. G., und Piontek, R. A., Vanadium Oxide in the Spectra of Mira Variables, Astrophysical Journal 538, 341–345 (2000b).
- CDS (2003), Centre de Données astronomiques de Strasbourg, http://cdsweb.u-strasbg.fr/Cats.html.
- Ferguson, J. W., Alexander, D. R., Allard, F., und Hauschildt, P. H., Grains in the Atmospheres of Red Giant Stars, Astrophysical Journal 557, 798–801 (2001).
- Fox, M. W. und Wood, P. R., Theoretical growth rates, periods, and pulsation constants for long-period variables, Astrophysical Journal 259, 198–212 (1982).
- Fox, M. W. und Wood, P. R., Shock waves in Mira variables. II Theoretical models, Astrophysical Journal 297, 455–475 (1985).
- Fox, M. W., Wood, P. R., und Dopita, M. A., Shock waves in Mira variables. I Emissionline spectra, Astrophysical Journal 286, 337–349 (1984).
- Gautschy, A. und Saio, H., Stellar Pulsations Across The HR Diagram: Part 1, Annual Review of Astronomy and Astrophysics 33, 75–114 (1995).
- Gautschy, A. und Saio, H., Stellar Pulsations Across the HR Diagram: Part 2, Annual Review of Astronomy and Astrophysics 34, 551–606 (1996).
- Gerthsen, C. und Vogel, H. (1997), Gerthsen Physik, Springer Verlag, Berlin, 19. edition.
- Gorbatskii, V. G., Origin of the Bright Hydrogen Lines in the Spectra of Long-Period Variables, Soviet Astronomy 5, 192 (1961).
- Gray, D. F. (1992), *The observation and analysis of stellar photospheres*, Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition.
- Greenstein, J. L. (1960), *Stellar atmospheres.*, [Chicago] University of Chicago Press [1961, c1960].

- Grevesse, N., Noels, A., und Sauval, A. J. (1992), Photospheric abundances, in *Coronal Streamers, Coronal Loops, and Coronal and Solar Wind Composition*, pages 305–308.
- Grevesse, N. und Sauval, A. J., Standard Solar Composition, Space Science Reviews 85, 161–174 (1998).
- Haniff, C. A., Scholz, M., und Tuthill, P. G., New Diameter Measurements of 10 Mira Variables - Implications for Effective Temperatures Atmospheric Structure and Pulsation Modes, Monthly Notice of the Royal Astronomical Society 276, 640–650 (1995).
- Hauschildt, P. H., A fast operator perturbation method for the solution of the special relativistic equation of radiative transfer in spherical symmetry, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 47, 433–453 (1992).
- Hauschildt, P. H., Allard, F., und Baron, E., The NextGen Model Atmosphere Grid for  $3000 \leq T_{\text{eff}} \leq =10,000 \text{ K}, \text{ Astrophysical Journal 512, 377-385 (1999a).}$
- Hauschildt, P. H., Allard, F., Ferguson, J., Baron, E., und Alexander, D. R., The NEXT-GEN Model Atmosphere Grid. II. Spherically Symmetric Model Atmospheres for Giant Stars with Effective Temperatures between 3000 and 6800 K, Astrophysical Journal 525, 871–880 (1999b).
- Hauschildt, P. H., Barman, T. S., Baron, E., und Allard, F. (2003), Temperature Correction Methods, in ASP Conf. Ser. 288: Stellar Atmosphere Modeling, page 227 ff.
- Hauschildt, P. H. und Baron, E., Numerical solution of the expanding stellar atmosphere problem, Journal of Computational and Applied Mathematics 109, 41–63 (1999).
- Hauschildt, P. H., Baron, E., und Allard, F., Parallel Implementation of the PHOENIX Generalized Stellar Atmosphere Program, Astrophysical Journal 483, 390–398 (1997).
- Hauschildt, P. H., Lowenthal, D. K., und Baron, E., Parallel Implementation of the PHOE-NIX Generalized Stellar Atmosphere Program. III. A Parallel Algorithm for Direct Opacity Sampling, Astrophysical Journal, Supplement 134, 323–329 (2001).
- Hoefner, S., Fleischer, A. J., Gauger, A., Feuchtinger, M. U., Dorfi, E. A., Winters, J. M., und Sedlmayr, E., Dynamical models of atmospheres of long-period variables: a comparative study., Astronomy and Astrophysics 314, 204–208 (1996).
- Hoffleit, D., History of the Discovery of Mira Stars, Journal of the American Association of Variable Star Observers 25, 115–136 (1997).
- Hofmann, K.-H., Balega, Y., Scholz, M., und Weigelt, G., Multi-wavelength bispectrum speckle interferometry of R Leo and comparison with Mira star models, Astronomy and Astrophysics 376, 518–531 (2001).
- Hubeny, I., Mihalas, D., und Werner, K., editors (2002), Stellar Atmosphere Modeling.
- Jones, H. R. A., Longmore, A. J., Allard, F., Hauschildt, P. H., Miller, S., und Tennyson, J., Water vapour in cool dwarf stars, Monthly Notice of the Royal Astronomical Society 277, 767–776 (1995).

- Jorgensen, U. G., Effects of TiO in stellar atmospheres, Astronomy and Astrophysics 284, 179–186 (1994).
- Jorgensen, U. G. und Larsson, M., Molecular opacities of astrophysical interest The A2Pi-X2Sigma(+) system of CN, Astronomy and Astrophysics 238, 424–434 (1990).
- Kholopov, P. N., Samus, N. N., Frolov, M. S., Goranskij, V. P., Gorynya, N. A., Karitskaya, E. A., Kazarovets, E. V., Kireeva, N. N., Kukarkina, N. P., Kurochkin, N. E., Medvedeva, G. I., Pastukhova, E. N., Perova, N. B., Rastorguev, A. S., und Shugarov, S. Y., Combined General Catalogue of Variable Stars (Kholopov+ 1998), VizieR Online Data Catalog 2214 (1999).
- Kirkpatrick, J. D., Henry, T. J., und McCarthy, D. W., A standard stellar spectral sequence in the red/near-infrared - Classes K5 to M9, Astrophysical Journal, Supplement 77, 417–440 (1991).
- Kopka, H. (1991), Latex: eine Einführung, Addison-Wesley (Deutschland) GmbH, Bonn, 3. edition.
- Lançon, A. und Wood, P. R., A library of 0.5 to 2.5 mu m spectra of luminous cool stars, Astronomy and Astrophysics Supplement 146, 217–249 (2000).
- Lattanzio, J. C., Stellar evolutionary models from the zero-age main sequence to the first thermal pulse, Astrophysical Journal, Supplement 76, 215–357 (1991).
- Lockwood, G. W., Near-Infrared Photometry of Mira Variables, Astrophysical Journal, Supplement 24, 375–420 (1972).
- Luttermoser, D. G., The Atmosphere of Mira Variables: A View with the Hubble Space Telescope, Astrophysical Journal 536, 923–933 (2000).
- Luttermoser, D. G. und Castelaz, M. W., Mira Variable Stars in the Far-UV: Results from FUSE, American Astronomical Society Meeting 202 (2003).
- Maceroni, C., Testa, V., Plez, B., García Lario, P., und D'Antona, F., Lithium during the AGB evolution in young open clusters of the Large Magellanic Cloud, Astronomy and Astrophysics 395, 179–187 (2002).
- Mattei, J. A., Introducing Mira Variables, Journal of the American Association of Variable Star Observers 25, 57–62 (1997).
- Mattei, J. A. (2002), Observations from the AAVSO International Database, http://www.aavso.org/, private communication.
- Mihalas, D., Model Atmospheres and Line Profiles for Early-Type Stars., Astrophysical Journal, Supplement 9, 321–437 (1965).
- Mihalas, D. (1970), Stellar atmospheres, Freeman, San Francisco, 1st edition.
- Mihalas, D. (1978), Stellar atmospheres, Freeman, San Francisco, 2nd edition.

- Mihalas, D., Solution of the comoving-frame equation of transfer in spherically symmetric flows. VI - Relativistic flows, Astrophysical Journal 237, 574–589 (1980).
- Orosz, J. A. und Hauschildt, P. H., The use of the NextGen model atmospheres for cool giants in a light curve synthesis code, Astronomy and Astrophysics **364**, 265–281 (2000).
- Ott, U. und Lugmair, G. W. (2003), Supernova Signatures in Meteorites, in From Twilight to Highlight: The Physics of Supernovae. Proceedings of the ESO/MPA/MPE Workshop held in Garching, Germany, 29-31 July 2002, p. 354., page 354 ff.
- Pavlenko, Y. V. und Jones, H. R. A., Carbon monoxide bands in M dwarfs, Astronomy and Astrophysics 396, 967–975 (2002).
- Perryman, M. A. C. und ESA (1997), The HIPPARCOS and TYCHO catalogues. Astrometric and photometric star catalogues derived from the ESA HIPPARCOS Space Astrometry Mission, The Hipparcos and Tycho catalogues. Astrometric and photometric star catalogues derived from the ESA Hipparcos Space Astrometry Mission, Publisher: Noordwijk, Netherlands: ESA Publications Division, 1997, Series: ESA SP Series vol no: 1200, ISBN: 9290923997 (set).
- Persson, S. E., Aaronson, M., und Frogel, J. A., Broad-band infrared colors and CO and H2O absorption indices for late-type dwarf stars, Astronomical Journal 82, 729–733 (1977).
- Piontek, R. und Luttermoser, D. G., T<sub>eff</sub> and Surface Garvity of Mira Variables, International Amateur-Professional Photoelectric Photometry Communications 73, 59–74 (1998).
- Piontek, R. A. und Luttermoser, D. G., Effective Temperature and Surface Gravity of Mira Variables, American Astronomical Society Meeting 194 (1999).
- Plez, B., Spherical opacity sampling model atmospheres for M-giants and supergiants. II -A grid, Astronomy and Astrophysics Supplement 94, 527–552 (1992).
- Plez, B., Brett, J. M., und Nordlund, A., Spherical opacity sampling model atmospheres for M-giants. I - Techniques, data and discussion, Astronomy and Astrophysics 256, 551–571 (1992).
- Press, W. H. und Flannery, B. P. (1988), *Numerical Recipes in C*, Press Syndicate of the University of Cambridge, Cambridge, 1st edition.
- Reimers, D., Mass loss at cool stars, Mitteilungen der Astronomischen Gesellschaft Hamburg 43, 70–85 (1978).
- Richichi, A., Fabbroni, L., Ragland, S., und Scholz, M., A homogeneous temperature calibration for K and M giants with an extension to the coolest stars, Astronomy and Astrophysics 344, 511–520 (1999).
- Richter, H. und Wood, P. R., On the shock-induced variability of emission lines in M-type Mira variables. I. Observational data, Astronomy and Astrophysics 369, 1027–1047 (2001).

- Richter, H., Wood, P. R., Woitke, P., Bolick, U., und Sedlmayr, E., On the shock-induced variability of emission lines in M-type Mira variables. II. Fe II and [Fe II] emission lines as a diagnostic tool, Astronomy and Astrophysics 400, 319–328 (2003).
- Rutten, R. J. (2002), Utrecht Radiative Transfer Courses, in Stellar Atmosphere Modeling.
- Scharmer, G. B., Solutions to radiative transfer problems using approximate lambda operators, Astrophysical Journal 249, 720–730 (1981).
- Schultheis, M., Lançon, A., Omont, A., Schuller, F., und Ojha, D. K., Near-IR spectra of ISOGAL sources in the inner Galactic Bulge, Astronomy and Astrophysics 405, 531–550 (2003).
- Schweitzer, A., Hauschildt, P. H., und Baron, E., Non-LTE Treatment of Molecules in the Photospheres of Cool Stars, Astrophysical Journal 541, 1004–1015 (2000).
- Schweitzer, A., Hauschildt, P. H., Baron, E., und Allard, F. (2002), Using Superlevels to Calculate Molecular NLTE, in *Stellar Atmosphere Modeling*.
- Schwenke, D. W. (1998), Opacity of TiO from a coupled electronic state calculation parametrized by AB initio and experimental data, in *Chemistry and Physics of Molecules and Grains in Space. Faraday Discussions No. 109*, pages 321–334.
- Shinkawa, D., The Mira Variable S Carinae, Astrophysical Journal, Supplement 25, 253– 273 (1973).
- Slutz, S., On the acceleration of shock waves in the atmosphere of cool Mira variable giants, Astrophysical Journal 210, 750–756 (1976).
- Stoecker, H. (1998), Taschenbuch der Physik: Formeln, Tabellen, Übersichten, Harri Deutsch, Thun; Frankfurt am Main, 3. edition.
- Tuthill, P. G., Haniff, C. A., Baldwin, J. E., und Feast, M. W., No Fundamental-Mode Pulsation in R-Leonis, Monthly Notice of the Royal Astronomical Society 266, 745–751 (1994).
- Unsöld, A. (1955), Physik der Sternatmosphären, mit besonderer Berucksichtigung der Sonne., Berlin, Springer, 1955. 2. Aufl.
- Unsöld, A. und Baschek, B. (2002), Der neue Kosmos: Einführung in die Astronomie und Astrophysik, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 7. edition.
- Vassiliadis, E. und Wood, P. R., Evolution of low- and intermediate-mass stars to the end of the asymptotic giant branch with mass loss, Astrophysical Journal 413, 641–657 (1993).
- Wallerstein, G. und Knapp, G. R., Carbon Stars, Annual Review of Astronomy and Astrophysics 36, 369–434 (1998).
- Weigert, A. und Wendker, H. J. (1996), Astronomie und Astrophysik, ein Grundkurs, Weinheim: Physik-Verlag, 1996, 3. edition.

Woo, M. Y., Schweitzer, A., und Castelaz, M. W., Modeling Phase-Resolved Spectra of Mira Variables, American Astronomical Society Meeting **199** (2001).

#### Danksagungen

Als erstes möchte ich mich ganz herzlich bei Prof. Dr. Peter H. Hauschildt für die Aufnahme in seine neu entstandene Arbeitsgruppe und die interessante Aufgabenstellung bedanken. Ihm als Entwickler von PHOENIX zuzuschauen, wie er meine fabrizierten Ergebnisse innerhalb von Sekunden interpretieren kann, ist bemerkenswert. Ein Dank auch dafür, daß er die ungezwungene und angenehme Stimmung in der Arbeitsgruppe maßgeblich prägt.

Ein herzlicher Dank geht an Prof. Dr. Dieter Reimers, der sich dieser Arbeit trotz jahrelanger Sternatmosphärenabstinenz als Zweitgutachter annehmen möchte.

Ein sehr großes Dankeschön geht an Andreas Schweitzer, der mich mit einer unglaublichen Geduld in PHOENIX und alle dazugehörigen Routinen eingewiesen hat. Die unerschütterliche Ruhe und Gelassenheit, sein Engangement und die gute Laune, die er an den Tag legt, ist überaus angenehm. Positiv sei ebenfalls sein guter Musikgeschmack vermerkt. Einzig in der Wahl des Editors wage ich ihm ein Fehlurteil zu unterstellen.

Norbert Christlieb danke ich dafür, daß er mich während des Studiums beim astrophysikalischen Praktikum durch einen seiner "anonymen" Fragebogen als studentische Aushilfe an die Sternwarte geworben hatte. Die Zusammenarbeit, die Beobachtung auf Las Campanas und der Kurzaufenthalt in Uppsala war überaus interessant und hat mir viel Spaß gebracht. Ohne diese Erfahrung wäre ich der Astrophysik bestimmt nicht so nahe gekommen.

Weiterer Dank geht an:

Mike Castelaz und Ariane Lançon für die Bereitstellung der Spektren,

Alexander Petz, der mich als Bürokollege tapfer ausgehalten hat, für den Austausch von ungesunden (aber leckeren) Spezialitäten am Nachmittag und das Korrekturlesen inklusive Eliminierung vieler *mans*,

Cora Fechner für ihre ungebrochene Begeisterungsfähigkeit und die netten Gespräche auf dem Weg zur Kantine,

Birgit Fuhrmeister für die Pflanzen, den gegenseitigen Austausch von Informationen am Telefon und das viele Korrekturlesen,

Sebastian Knop für die chinesischen Geschichten und die Gemüsekunde,

Derek Homeier für seinen Friedenseinsatz und die Töpfe,

allen Krankenhaus-Kantinengehern für die Tischgespräche und die gemeinsame Beratschlagung über das geschmackvollste Gericht des Tages,

allen In-der-Küche-Essern für die Tischgespräche, den Essensduft und die Beratschlagung, was es in der Krankenhauskantine wohl gegeben habe,

Amelie Busch, Annette Müller, Angelika Kleinoth und Anke Vollersen für die Kekse nach dem Essen und die nette Zusammenarbeit,

alle bisher nicht erwähnten SternwärterInnen, die selbige durch ihre Art zu etwas besonderem machen,

die fünf nördlichen Bundesländer, also an alle Steuerzahler, für die Inbetriebnahme des Hochleistungsrechenzentrums Norddeutschland (HLRN), dessen Einsatz trotz Dateisystemroulettes die benötigte Rechenzeit erheblich minimierte,

die *bestimmte* Gruppe von Physikerinnen und Physikern, der ich für die netten Seminare, die Videoabende und die Vermittlungversuche in Sachen "physikalischer Einstellung" danke,

Verena Klose, Kai Schmitt–Hoberg und Björn Wonsak für die Freuden und überstandenen Mühen des teilweise gemeinsam verbrachten Studiums,

Ines Brott für ihre ungezwungende, liebenswerte und chaotische Art, das "geruhsame" Leben in der Arbeitsgruppe aufzulockern,

Fabian Wenzel für die vielen fachübergreifenden Diskussionen in Sachen Natur- und Ingenieurswissenschaften, Braukunst und guter Musik,

Katharina Barnbrock für ihren positiven und motivationsfördernden Einfluß.

Ganz besonders danke ich meinen Eltern für ihre Hilfe und Unterstützung. Ohne sie wäre dieses Studium nicht möglich gewesen.

### Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

\_\_\_\_\_

Hamburg, den \_\_\_\_\_