

**Ammoniak, Formaldehyd, Methanol und  
Schwefelwasserstoff im Kometen P/Halley - Messungen  
mit dem Giotto Neutralmassenspektrometer**

**Inauguraldissertation  
der Philosophisch-naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Universität Bern  
zur Erlangung der Doktorwürde**

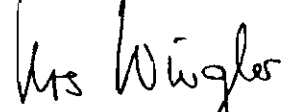
**vorgelegt von  
Roland Meier  
von Tägerig**

**Leiter der Arbeit: Prof. Dr. P. Eberhardt  
Physikalisches Institut der Universität Bern**

**Von der Philosophisch-naturwissenschaftlichen Fakultät auf  
Antrag des Herrn Prof. Dr. P. Eberhardt angenommen**

**Bern, den 26. Juni 1992**

**Der Dekan:**



**Prof. Dr. U. Würgler**

# Inhaltsverzeichnis

	<i>Seite:</i>	
1	Einleitung	1
1.1	Übersicht	1
1.2	Abstract	3
1.3	Das Giotto NMS	5
2	Detektoreichung des NMS-Massenanalysators	10
2.1	Laboreichungen, Aufbereitung der Rohdaten - eine Übersicht	10
2.2	Transmission	17
2.3	Der "Toggle-Effekt"	19
2.4	Spektrenvergleich bei verschiedenen Verstärkungsstufen des Detektors während des Fluges	23
2.5	Einfluss der Projektilstruktur und Projektilgeschwindigkeit auf die MCP-Verstärkung	26
2.5.1	Zur Literatur über die ioneninduzierte kinetische Elektronenemission an Metalloberflächen	26
2.5.2	Messungen an Microchannel Plates	29
2.5.3	Resultate	34
2.5.4	Auswirkungen auf das NMS	46
3	Komamodell mit detaillierter Chemie	50
3.1	Einleitung	50
3.2	Ein einfaches Komamodell	52
3.2.1	Übersicht	52
3.2.2	Opazität	54
3.2.3	Expansionsgeschwindigkeit	57
3.2.4	Temperaturen	60
3.3	Das Reaktionsnetzwerk	63
3.4	Wasser in der Koma des Kometen P/Halley	66

(Fortsetzung Inhaltsverzeichnis)

	<i>Seite:</i>
4 Interpretation von NMS-Ionenspektren mit Hilfe des Komamodelles	74
4.1 Strategie der Auswertung	74
4.2 Wasser (H <sub>2</sub> O) und Ammoniak (NH <sub>3</sub> ) im Kometen P/Halley	81
4.3 Ionen der Massen 31 bis 35 u/e - eine Übersicht	94
4.4 Schwefelwasserstoff (H <sub>2</sub> S) im Kometen P/Halley	95
4.5 Methanol (CH <sub>3</sub> OH) im Kometen P/Halley	99
4.6 Formaldehyd (H <sub>2</sub> CO) in der Koma von P/Halley	102
4.7 Die ausgedehnte Formaldehydquelle in der Koma von P/Halley	105
4.8 Die Masse 34 u/e in den NMS-Ionenspektren des M-Analysators	111
4.9 Gesamtrechnung	114
5 Zusammenfassung und Ausblick	119
6 Literaturverzeichnis	121
7 Verdankungen	130
8 Lebenslauf	131

# 1 Einleitung

## 1.1 Übersicht

Seit jeher sind Kometen als aussergewöhnliche Himmelserscheinungen dokumentiert worden. Dennoch waren Kometen wahrscheinlich bis vor kurzem die am wenigsten bekannten Objekte unseres Sonnensystems. Entsprechend jung ist auch die Wissenschaft, die sich mit Kometen befasst. Das grundsätzliche Wesen eines Kometen wurde erst in der zweiten Hälfte dieses Jahrhunderts richtig erkannt [Whipple, 1950; Oort, 1950; Biermann, 1951; Delsemme, 1952]. Einen wahren Schub an neuen Erkenntnissen brachte die weltweit durch die Halley Watch koordinierte Kapagne zur Untersuchung des Kometen P/Halley im Jahre 1986. Erstmals wurde ein Komet sowohl von erdgebundenen Instrumenten wie auch von Raumsonden aus (ICE, Sakigake, Suisei, Vega 1, Vega 2, Giotto) beobachtet. Die Satellitenexperimente brachten vor allem neue Einsichten über die Abläufe nahe beim Kometenkern, die bisher allen Fernerkundungsmethoden verborgen blieben. Erstmals gelang es unter anderem, Bilder eines Kometenkerns aufzunehmen. Viele Vermutungen über Kometen wurden bestätigt, andere mussten revidiert werden.

Höhepunkt der Erkundung von P/Halley war der Durchflug der europäischen Raumsonde Giotto durch die Koma des Kometen am 13. März 1986. Die Sonde näherte sich dem Kometenkern bis auf  $596 \pm 2$  km [Reinhard, 1988]. Bei zwei der zehn wissenschaftlichen Experimenten an Bord von Giotto war die Universität Bern massgeblich beteiligt (*Neutral Mass Spectrometer (NMS)* und *Ion Mass Spectrometer (IMS)*). Gegenstand dieser Arbeit ist das NMS (*Neutral Mass Spectrometer*), wobei schwergewichtig nur der Massenanalysator des NMS angesprochen wird. Gebaut und ausgewertet wurde das Instrument in internationaler Zusammenarbeit unter Leitung von Dr. D. Krankowsky (MPI für Kernphysik, Heidelberg). Beteiligt waren das Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg (Deutschland), die University of Texas at Dallas (USA), das Centre de Recherches en Physique de l'Environnement Terrestre et Planétaire in Saint-Maur des Fossés (France) sowie das Physikalische Institut in Bern (Schweiz).

Weshalb sind Kometen von wissenschaftlichem Interesse? Was erhofft man sich aus dem besseren Verständnis dieser Objekte? Man ist heute überwiegend der Auffassung, dass Kometen aus relativ wenig verändertem "Urmaterial" unseres Sonnensystems zusammengesetzt sind. Die Beschaffenheit des Kometenmaterials hat sich im Verlaufe der Zeit seit der Entstehung unseres Sonnensystems kaum gewandelt. Einerseits ist das Reservoir an Kometenmaterial derart weit weg von unserem Zentralgestirn Sonne, dass weitreichende chemische Veränderungen nicht zu erwarten sind. Andererseits sind Gravitationskräfte wegen der relativ kleinen Ausdehnung der Kometenkerne vernachlässigbar. Ebenso ist der Heizeffekt durch intrinsischen radioaktiven Zerfall unbedeutend. Der Kometenkern kann höchstens dann durch den radiaktiven Zerfall von  $^{26}\text{Al}$  ( $7.4 \cdot 10^5$  Jahre Halbwertszeit) zum Schmelzen gebracht werden, wenn er bei der Entstehung unseres Sonnensystems innerhalb der ersten  $10^6$  Jahre

gebildet wurde, die Kerngrösse  $\geq 10$  km ist, und der Kern einen relativ hohen Anteil von  $\sim 10\%$  chondritischem Material enthält (in welchem das Zerfallsprodukt  $^{26}\text{Mg}$  identifiziert wurde) [Wallis, 1986]. Der hohe Wassergehalt des Kerns von P/Halley sowie die bis jetzt noch nicht entgültig bestätigte Vermutung, dass Kometen komplexe Polymere enthalten, gibt Anlass zu Spekulationen. Verschiedentlich wurde versucht, das Wasser [Delsemme, 1989] und sogar das Leben auf der Erde [Chyba, 1991] mit Kometen in Verbindung zu bringen. Ungeachtet der letzteren, mehrheitlich gewagten Schlüsse, haben Kometen oder Meteoriten eindeutig Spuren auf unserem Planeten hinterlassen.

Aus einem ganz anderen Blickwinkel gesehen geben Kometen auch die Gelegenheit, physikalische Phänomene zu untersuchen, die sich in keinem Labor durchführen lassen. Aufzuführen ist hierzu exemplarisch das weitgehend noch im Fluss befindliche Gebiet der Schockphänomene zwischen Plasmen.

Die vorliegende Arbeit besteht im wesentlichen aus drei Teilen. Im ersten Abschnitt wird der Weg dargelegt, wie die gemessenen Rohdaten des NMS von Detektoreinflüssen befreit werden können. Eine kurze Übersicht fasst die wichtigsten Erkenntnisse aus der Kalibrierphase im Labor zusammen. Anschliessend folgt eine ausführliche Erörterung der Detektorrekturen, die sich erst im Verlaufe der Flugdatenauswertung aufdrängten. Kernstück des ersten Teiles sind die experimentellen Untersuchungen an Microchannel Plates, deren Nachweismempfindlichkeit sowohl von der Geschwindigkeit wie auch von der chemischen Struktur des Projektils abhängt. Neben einer umfangreichen Liste an untersuchten Projektionen zeigt dieses Kapitel auch auf, wie mit Hilfe eines semiempirischen Ansatzes die Detektorempfindlichkeit für ein vorgegebenes Projektilion berechnet werden kann.

Der zweite Abschnitt der Arbeit befasst sich mit Problemen aus der Kometenphysik im engeren Sinne. Zuerst wird ein einfaches Komamodell vorgestellt, das sich vor allem zur Beschreibung der inneren Koma eignet. Die umfangreiche, gegen 3500 Reaktionen umfassende Datenbank von Reaktionskonstanten erlaubt eine detaillierte Modellierung der Chemie bis zur Kontaktfläche. Die Funktionsweise und die wichtigsten Parameter des Komamodelles werden diskutiert und kritisch beleuchtet. Es wurde angestrebt, möglichst alle physikalischen Grössen wie Geschwindigkeiten, Gasdichten, Temperaturen, etc., aus den Daten des NMS abzuleiten. Deshalb werden unter anderem aus den Wassermessdaten einige wichtige Modellparameter bestimmt.

Basierend auf dem neu entwickelten Komamodell folgt im letzten Teil eine Interpretation der NMS-Ionenspektren mit Schwergewicht auf den Massenlinien der Massen 31 - 35 u/e. Es gelingt, eindeutig Schwefelwasserstoff, Methanol und Formaldehyd zu identifizieren. Die hohe Präzision der Messungen ermöglicht eine Unterscheidung zwischen Gasen, die direkt vom Kern stammen, und solchen, die erst während der Expansion der Koma ins Vakuum aus dem Staub oder einem komplexeren Molekül abgegeben werden. Ausführlich diskutiert wird ausserdem der Ammoniakgehalt der Wasseratmosphäre auf Grund der Massenlinien 17 - 19 u/e. In der Datenauswertung des NMS hat sich der in diesem Bericht beschrittene Weg als erfolgreich erwiesen. Wie insbesondere aus dem Schlussteil hervorgeht, ist die Datenauswertung längst nicht abgeschlossen. Die hier beschriebene Methode der Spektrenidentifikation ist sicherlich noch nicht ausgeschöpft. So gesehen darf erwartet werden, dass in naher Zukunft der eindeutige Nachweis weiterer Spezies in der Koma von P/Halley gelingen wird.

## 1.2 Abstract

On March 13, 1986 the Giotto spacecraft passed the nucleus of comet P/Halley at a closest approach of  $596 \pm 2$  km [Reinhard, 1988] on the sunward side. The Neutral Mass Spectrometer (NMS) was one out of ten scientific instruments on board of Giotto. Its primary objective was the determination of the chemical composition of gases and ions, the elemental abundances and isotopic ratios in the coma of comet P/Halley. The NMS sensor box contains two independent analyzers: A double-focussing mass spectrometer using a magnet as momentum filter (*M-analyzer*) and an electrostatic energy analyzer (*E-analyzer*) with second order angular focussing. The M-analyzer covers the mass range from 1 to 37 amu/e with a half peak width of 0.5 amu/e at the 1% level. In the neutral mode the E-analyzer observes the energy band from 200 to 2'150 eV sampled in three steps. For thermal particles these energies correspond to a mass scale from 8 to 86 amu/e. In the ion mode the energy band of the E-analyzer extends from 20 to 1'420 eV, i.e. from 1 to 56 amu/e. The present work is mainly based on data of the M-analyzer.

The M-detector consists of four microchannel plates (*MCPs*) followed by self-scanning arrays of electron collectors (*SSACs*). The MCPs are placed end to end in the focal plane of the M-analyzer. By altering the high voltage (*MHV*) across the MCPs (fifteen gain steps (*GS*)), the detector gain (gain = number of collected electrons on the SSACs / number of incident ions) could be changed by more than six orders of magnitude.

A short review of the laboratory calibrations is presented. We used a neutral or ionized beam of molecular nitrogen to calibrate the MCPs. For each MCP the averaged gain of the 16 mean pixels, called "*unified gain*", is measured. An individual gain for each pixel ("*relative gain*") as well as a nonlinearity correction is considered. However, further detector corrections were necessary to interpret the inflight data:

- (1) Periodically the mass spectra were shifted on the detector to prevent a possible data loss by locally damaged MCPs or SSACs. Thereby, due to the grids in front of the detector, a systematic difference in the peak height between shifted and unshifted spectrum can be observed. As a function of mass and instrumental mode (neutral or ion mode) the peak height of the two types of spectra were adjusted.
- (2) To enlarge minor peaks the NMS records every second spectrum at a higher MCP-voltage. The difference corresponds to three gain steps. Again a systematic offset could be observed. A scaling factor was derived to determine the true particle counting rate of the regular and of the enlarged spectrum (*GS/HG-effect*). The GS/HG effect results from a gain shift during the time between the laboratory calibration phase and the flyby at comet P/Halley.

The detector sensitivity does not only depend on the MCP voltage applied but also on the incident velocity and chemical structure of the projectile. For two different MCP high voltages of 1.2 and 1.7 kV the detector gain was measured for various ions like  $H^+$ ,  $H_2^+$ ,  $N^+$ ,  $O^+$ ,  $CH_4^+$ ,  $NH_2^+$ ,  $NH_3^+$ ,  $H_2O^+$ ,  $C_2H_3^+$ ,  $CO^+$ ,  $N_2^+$ ,  $C_2H_5^+$ ,  $NO^+$ ,  $S^+$ ,  $H_2S^+$ ,  $Ar^+$ ,  $C_3H_5^+$ ,  $C_3H_7^+$ ,  $CO_2^+$ ,  $C_4H_{10}^+$ ,  $Kr^+$  and  $Kr^{++}$ . As expected the gain varies with velocity and projectile structure in accordance

with observations in secondary electron emission experiments on metallic surfaces. A semiempirical addition law was found to be very useful to predict gain curves of other, not yet measured species: First the gain curves  $G_i(v)$  of *atomic* ions are characterized by a Parilis-Kishinevskii type function with the formula  $G_i(v) = A(i) \cdot v \cdot \arctan\{B(i) \cdot [C(i) - v]\}$ . Herein  $v$  is the velocity of the projectile and  $A(i)$ ,  $B(i)$  and  $C(i)$  are species dependent parameters. The gain of a *molecular* ion is computed by simply adding all the gains of the corresponding atomic constituents. The coefficients  $A(i)$ ,  $B(i)$  and  $C(i)$  were determined by a fit according to Levenberg-Marquard to all H, C, N, O and S bearing atomic and molecular ion data. Despite of the reduced number of free parameters the restriction to a common, species independent threshold velocity  $C(i) = C$  does not impair the fit substantially. A discussion about impacts on the detector calibration completes the chapter.

Chapters 3 and 4 mainly concentrate on cometary physics. A model for the coma within the contact surface is presented. The absence of a magnetic field in the coma inside the contact surface simplifies physics to some extent. Radial symmetry is assumed. From an initial molecular composition in a concentric shell of infinitesimal thickness at a distance  $R = 100$  km from the nucleus the ion and gas chemistry under solar UV-irradiation is simulated. Based on an identical outflow velocity for all neutral and ionized species a single shell expanding with  $R^2$  can be assumed as reaction volume (velocity profile according to *Lämmerzahl et al.* [1987], NMS E-analyzer). An extended chemical network including almost 3500 reactions enables detailed chemical modeling. In order to make sure that our assumptions do not oversimplify the fundamental physical processes in the coma we had to check several points of the model:

- (1) Only in the innermost part of the coma ( $R \leq 100$  km) cometary molecules and dust reduce the UV-opacity of the coma. The coma simulation was done only outside of this crucial boundary. We are primarily interested in cometocentric distances beyond 1000 km where especially the ion population has entirely recovered from the UV-reduction close to the nucleus. Therefore the UV-absorption may be neglected.
- (2) The assumption of a common expansion velocity does not hold for all species. At least part of the light hydrogen gases will probably expand much faster than the bulk mass. The results obtained with the *one fluid* assumption for the mass range beyond 12 amu/e are not significantly affected by neglecting a separate velocity for fast hydrogens components.
- (3) Two different temperatures are introduced: A radial temperature profile for gases and one for electrons. While the gas temperature does not influence the chemistry of the coma at all the electron temperature has a major impact on the electron recombination reactions. Due to the lack of experimental data an electron temperature profile was deduced from a few coma models published by various authors.

From the NMS gas spectra the source production rate of the most abundant cometary molecule,  $H_2O$ , was determined. The water density decreases faster with cometocentric distance than theoretically predicted for minimal solar activity. To fit our data we concluded the solar activity to be slightly above the minimum during the Giotto encounter with comet P/Halley.

Initially pure ammonia-water comae were simulated, later on referred to standard coma. Other molecules, in most cases at least two orders of magnitude less abundant than water, are only quasi linear perturbations of this standard coma. For many potential cometary molecules this linear perturbation was computed. For a given chemical composition a special computer program generates mass spectra using this linear perturbation functions. The initial conditions are varied until the results agree with the ion measurements. This approach leads to new conclusions:

The observed peaks of the water group in the NMS ion spectra are only consistent with an ammonia source production rate of approximately  $(1.5 \pm 0.5)\%$  relative to water. This result contradicts optical observations suggesting ammonia densities lower by a factor of ten.

Detailed ion chemical modeling showed that the cometary ions with  $m/q = 33$  amu/e are predominantly  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$ . These ions result from the protonation of methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ). From the nine ion spectra recorded inside the contact surface at distances between 1'350 and 4'350 km from the nucleus we obtained a methanol production rate  $Q(\text{CH}_3\text{OH})/Q(\text{H}_2\text{O}) = (0.74 \pm 0.15)\%$ . There is no indication for an extended methanol source originating either from a parent molecule or from dust.

Within the contact surface the ions  $\text{H}_3\text{CO}^+$  and  $\text{H}_3\text{S}^+$  are the dominant contributions to the  $m/q = 31$  and  $35$  amu/e mass positions in the ion mass spectra. These ions originate from the protonation of formaldehyde ( $\text{H}_2\text{CO}$ ) and hydrogen sulfide ( $\text{H}_2\text{S}$ ). The high resolution ion mass spectra obtained by the NMS allow a detailed study of these ion abundances within the contact surface of comet P/Halley with a spatial resolution of 400 km. The observed  $35^+$  density corresponds to a  $Q(\text{H}_2\text{S})/Q(\text{H}_2\text{O})$  of  $(0.40 \pm 0.15)\%$ . The radial ion profile is essentially in accordance with  $\text{H}_2\text{S}$  originating only from the nucleus.

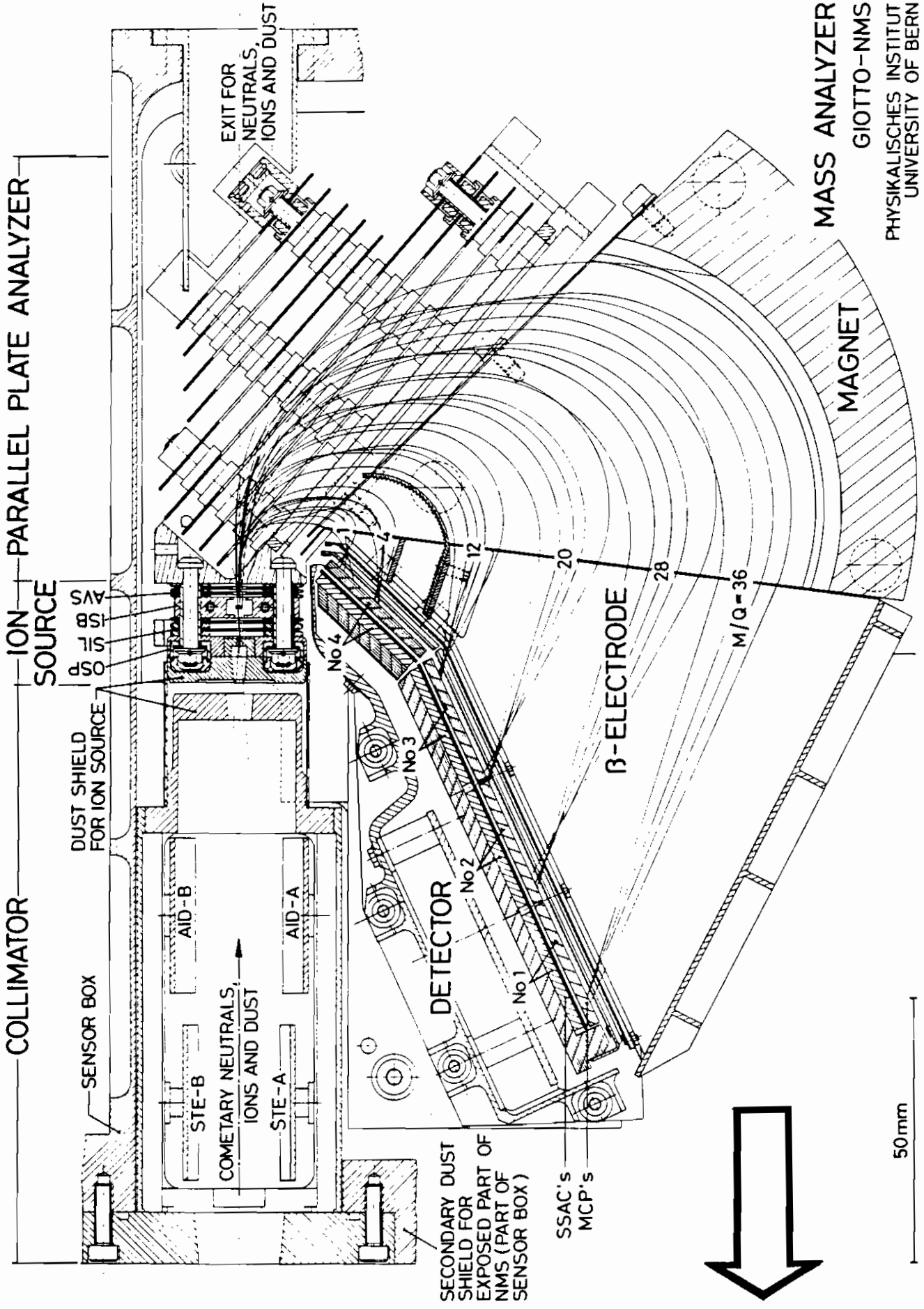
The radial ion density profile for  $m/q = 31$  amu/e cannot be reconciled with formaldehyde originating from the nucleus only. We obtain an upper limit for the formaldehyde production from the nucleus  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O})$  of approximately 2.5%. As previously suspected, an extended source for formaldehyde is present, either from a parent molecule or associated with the dust. From the high precision NMS data the source strength of this extended source is derived with a spatial resolution of less than 1'000 km.

Mass 34 amu/e serves as a test of consistency. Mass 34 amu/e can be explained by  $\text{H}_2\text{S}^+$  from hydrogen sulfide and contributions by isotopes from  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  and  $\text{S}^+$ . Terrestrial isotopic ratios are assumed. In addition the unidentified ions of mass 32 amu/e are considered to be sulfur ions. The measured radial density profile of  $34^+$  agrees with this interpretation.

### 1.3 Das Giotto NMS

Innerhalb der Giotto-Mission war das NMS (*Neutral Mass Spectrometer*) das Schlüsselexperiment bei der Untersuchung der neutralen Gase in der Koma von P/Halley. Zusätzlich zu den Gasspektren nahm das NMS entlang der Giotto-Flugbahn auch Massenspektren von niederenergetischen Ionen auf. Die Gesamtheit aller Messungen soll Aufschluss geben über die chemische Zusammensetzung sowie die Element- und Isotopen-





MASS ANALYZER  
GIOTTO-NMS  
PHYSIKALISCHES INSTITUT  
UNIVERSITY OF BERN

**Figur 1:** Der M-Analysator im Querschnitt (Figur auf Seite 6). Eingezeichnet sind die Ionenbahnen mit Massen 1, 4, 12, 20, 28 und 36 u/e. Bei Nominalenergien (d.h. 25 eV/u) sind als Einfallswinkel  $\alpha = 0^\circ$  und  $\alpha = \pm 3.5^\circ$ , bei einem nominalen Einfallswinkel  $\alpha = 0^\circ$  sind die Energien  $E = \pm 5$  eV eingetragen. Der dicke Pfeil markiert die Flugrichtung der Raumsonde (Figur nach Dolder [1986]).

häufigkeiten im Kometen P/Halley. Die NMS-Daten enthalten auch Informationen über Expansionsgeschwindigkeiten und Temperaturen der gasförmigen und ionisierten Komponenten. Die hohe Vorbeifluggeschwindigkeit von 68.373 km/s [Reinhard, 1988] relativ zum Kometenkern erforderte eine unkonventionelle Bauweise des Spektrometers, die im folgenden kurz erläutert wird. Eine eingehendere Beschreibung des Instrumentes findet man bei Krankowsky *et al.* [1986a] und Dolder [1986].

Im Gehäuse des NMS-Experimentes sind zwei unabhängige Instrumente untergebracht: Ein doppelfokussierendes Massenspektrometer (*M-Analysator*) sowie ein elektrostatischer Energieanalysator mit Winkelfokussierung zweiter Ordnung (*E-Analysator*). Der M-Analysator deckt den Masse-pro-Ladungs-Bereich von 1 u/e bis 37 u/e ab. Die halbe Linienbreite auf dem 1%-Niveau beträgt dabei  $\sim 0.5$  u/e. Der E-Analysator ist ähnlich aufgebaut wie der M-Analysator, aber es fehlt der Sektormagnet, der im M-Analysator als Impulsfilter wirkt. Ausserdem ist die aktive Detektorfläche nur halb so gross wie beim M-Analysator.

Vom NMS-Bezugssystem aus gesehen strömen alle kometären Teilchen mit konstanter Geschwindigkeit und damit massenabhängiger Energie durch die beiden Eintrittsöffnungen des NMS. Der E-Analysator erfüllt demzufolge auch die Funktion eines Massenspektrometers, solange die thermische Linienverbreiterung die Linienidentifikation nicht verunmöglicht. Unterteilt in drei Stufen untersuchte der E-Analysator im Neutralmodus das Energieband zwischen 200 eV und 2150 eV. Im Ionenmodus konnte in zwei Stufen der Energiebereich zwischen 20 eV und 1420 eV erfasst werden. Für kalte Teilchen entsprechen die Energiebereiche Massenskalen von 8 - 86 u/e (*Neutralmodus*), beziehungsweise 1 - 56 u/e (*Ionenmodus*).

Eine gemeinsame, programmierbare Elektronik steuert beide Analysatoren. Sie ist in einem separaten Modul zusammengefasst. Die vorliegende Arbeit stützt sich vor allem auf Daten des M-Analysators. Deshalb beziehen sich die folgenden Angaben immer auf den M-Analysator des geflogenen Instrumentes FS(r), sofern nicht anders vermerkt. Figur 1 zeigt einen Schnitt durch den M-Analysator. Er besteht aus dem Kollimator, der Ionenquelle, dem elektrischen und magnetischen Analysierfeld sowie der Detektoreinheit.

#### *Kollimator:*

Das Gemisch aus Staub, Gas und Ionen fliegt mit der hohen Geschwindigkeit von  $\sim 68$  km/s durch die Eintrittsöffnung in den Kollimator des NMS M-Analysators. Der Kollimator ragt über den Rand des Satellitenschutzschildes hinaus, welches die Instrumentenplattform in Flugrichtung gegen Staubeinschläge schützt. Alle Komponenten, die dem kometären Strahl unmittelbar ausgesetzt sind, sind speziell verstärkt. Der langegezogene Kollimator begrenzt das Gesichtsfeld auf  $\pm 4^\circ$  relativ zur Sollrichtung. Die Begrenzung erfolgt sowohl in  $\alpha$ -Richtung, d.h. in der Zeichenebene, wie auch senkrecht dazu in  $\beta$ -Richtung. Im Kollimatorgang befinden sich die beiden Ablenkplattenpaare STE (*Steering Electrodes*) und AID (*Ambient Ion Deflection Plates*). Im Neutralmodus erzeugt man mit beiden Plattenkondensatoren ein elektrisches Feld in dieselbe Richtung. Dieses elektrische Querfeld koppelt die kometären

Ionen aus dem Gas-Staub-Strahl aus.

In Distanzen ausserhalb 350'000 km vom Nukleus war der sogenannte SIS-Messzyklus (*Steered Ion Sequence*) aktiv. In diesem Modus sind die AID-Feldvektoren den STE-Feldvektoren entgegengesetzt. Schrittweise konnten so je nach Plattenspannung Ionen aus  $\alpha$ -Richtungen bis zu 30° gegenüber der optischen Achse eingelenkt werden. In Kombination mit der Satellitenrotation (0.25 Hz) entstanden dadurch vom Raumwinkel abhängige Ionenspektren. Wenn das NMS in den normalen Ionenmodus ohne Winkel-Scan umschaltet, werden die STE- und AID-Platten auf das Kollimatorgehäuse kurzgeschlossen.

#### *Objektschlitz und Ionenquelle:*

Die engste Stelle in der Optik bildet der rechteckförmige,  $0.36 \times 5.0 \text{ mm}^2$  messende Objektschlitz eingangs der Ionenquelle. Nach dem Objektschlitz wird der freie Raum um die optische Achse immer grösser (sog. *Fligh-Through-Geometrie*). Dadurch werden Wandkollisionen mit den schnellen kometären Partikeln verhindert, bei denen störende Sekundärionen oder Sekundärelektronen entstehen würden. Die SIL-Linse hinter dem Objektschlitz erzeugt im Neutralmodus sicherheitshalber nochmals ein Sperrpotential gegen kometäre Ionen.

Im Neutralmodus erfolgt die Ionisation der Gase im ISB-Block (*Ion Source Block*). Auf beiden Seiten senkrecht zur Zeichenebene schliesst je eine Elektronenquelle den ISB-Raum ab. Wenn keine Unregelmässigkeiten auftreten, ist nur eine der beiden Elektronenquellen in Betrieb. Die Elektronen werden aus einem geheizten Wolfram-Rhenium-Bändchen gegen ein Anodenplättchen hin beschleunigt. Durch eine  $0.5 \times 1.4 \text{ mm}^2$  grosse Öffnung in der Anode fliegt ein Teil der Elektronen durch den ISB-Ionisationsraum. Die Elektronen durchqueren den kometären Gasstrahl in der Mitte des ISB in einem rechten Winkel. Das gegenüberliegende, inaktive Heizbändchen dient als Elektronenmonitor. Ein magnetisches Führungsfeld verhindert eine allzu starke Aufweitung des Elektronenstrahles durch dessen eigenes Raumladungsfeld.

Die neutralen Komponenten können entweder mit  $\sim 18 \text{ eV}$  (*LeV-Modus*) oder  $\sim 90 \text{ eV}$  (*HeV-Modus*) Elektronen ionisiert werden. Die Einführung zweier verschiedener Elektronenenergien ermöglicht eine bessere Identifikation der neutralen Moleküle. Moleküle mit gleicher Masse pro Ladung aber stark unterschiedlichem Ionisationspotential können aus dem Vergleich der Spektren im HeV- und LeV- Modus auseinander gehalten werden. Ausserdem liefern die unterschiedlichen Fragmenthäufigkeiten durch dissoziative Stossionisation in Abhängigkeit der Elektronenenergie wertvolle Hinweise auf die chemische Struktur. Ionisiertes Restgas hält die AVS-Linse (*Accelerating Voltage Shield*) im ISB-Raum zurück, indem sie alle Ionen mit thermischen Energien durch einen Potentialberg abblockt.

#### *Elektrisches und magnetisches Analysierfeld:*

Der Parallelplattenanalysator separiert die Ionen nach Energie. Dank den rechteckförmigen Fenstern in den neun parallel angeordneten Platten können sich die Ionen im homogenen elektrischen Feld bewegen, ohne dass sie auf ein Hindernis stossen. Nicht ionisiertes Gas sowie Staubpartikel verlassen das Instrument geradlinig durch die Öffnungen im Parallelplattenanalysator. Das elektrische Ablenkfeld beträgt abwechslungsweise 31'650 V/m (*Toggle 0*) oder 34'210 V/m (*Toggle 1*). Nach jedem Telemetryformat wechselt der M-Analysator auf die jeweils andere Feldstärke. Dadurch kann das Spektrum auf dem Detektor um ca. 2 Masseneinheiten hin und her geschoben werden. Signale, die auf defekte oder

gestörte Stellen des Detektors fallen, sind so zumindest in der Hälfte aller Spektren auswertbar. Ein Gitter schirmt das elektrische Feld gegen den Magneten hin ab. Der 50°-Sektormagnet weist zwischen den Polschuhen einen Spalt von 5 mm Höhe auf. Der Permanentmagnet besteht aus einer Samarium-Praseodym-Kobalt-Legierung und erzeugt im Zentrum des Magnetpalt es eine Magnetfeldstärke von 0.7 Tesla.

#### *Detektoreinheit:*

Nach einer freien Flugstrecke in der  $\beta$ -Elektrode erreichen die massenaufgelösten Ionen die Detektoreinheit. Der Detektor besteht aus vier Microchannel Plates (MCPs). Die MCPs stehen nebeneinander in der Fokallinie des M-Analysators und wirken als positionsabhängige Ladungsverstärker. Die Detektorplatte Nr. 1 registriert die schwersten Ionen und die gegenüber den übrigen Platten abgewinkelte Detektorplatte Nr. 4 die leichtesten. Microchannel Plates bestehen aus einer Vielzahl miniaturisierter Sekundärelektronenvervielfachern in Form von Röhrcen mit einem Durchmesser von 25  $\mu\text{m}$ . Sie sind gekrümmt ("C-shaped") und innwendig mit einem hochohmigen Halbleitermaterial beschichtet. Ihre Fläche beträgt je 25.4 $\times$ 15 mm<sup>2</sup>. Sie sind 2 mm dick und der Hersteller war *Philips Composant* in Frankreich. Eine angelegte Hochspannung zwischen der leitenden Vorder- und Rückseite der MCPs sorgt entlang der Kanäle für ein elektrisches Feld. Trifft ein Ion auf ein MCP, so schlägt es Elektronen in einem der Kanäle heraus. Infolge des elektrischen Feldes entlang des Kanales werden die Elektronen beschleunigt. Sie lösen durch weitere Wandkollisionen eine ganze Elektronenlawine aus, welche dann am anderen Ende des MCPs als messbarer elektrischer Puls austritt. Die Krümmung der Kanäle hilft, Störpulse durch Sekundärionen zu unterdrücken. Diese Sekundärionen entstehen durch Ionisation von Restgas, das sich in den Kanälen befindet. Die Sekundärionen laufen, beschleunigt durch das elektrische Feld, den Elektronen entgegen.

Die aus dem MCP austretenden Elektronenlawinen werden auf einer SSACs-Platte (*Self Scanning Arrays of Discrete Electron Collectors*) gesammelt, welche aus 64 Halbleiterstreifen (*Pixel*, 0.4 mm breit und 5 mm hoch) besteht. Die MCPs ermöglichen so eine ortsabhängige Ionendetektion. Die insgesamt vier SSACs-Platten, die den vier MCPs entsprechen, ergeben zusammen 256 Pixel. Die akkumulierten Ladungen auf den Pixel werden alle 62.96 ms ausgelesen, über einen 12 bit A/D-Wandler digitalisiert, und in einem Zwischenspeicher nach Pixel geordnet gesammelt. Je nach Messzyklus ergeben zwischen 7 bis 18 Auslesungen ein Spektrum oder Untergrundspektrum. Jeder Pixelwert wird über die Anzahl Auslesungen gemittelt und in eine 8 bit Zahl codiert. Messungen über eine Beobachtungszeit von 22.67 s werden zu einem Telemetrieformat zusammengefasst und über den Satellitenparabolspiegel zur Erde übermittelt. Je nach Art des Telemetrieformat es enthält eine solche Dateneinheit verschiedene Ionen- und Neutralspektren inklusive zugehörige Untergrundspektren. Zusätzlich geben eine Reihe von Instrumentenkontrollparameter Aufschluss über den Zustand des Instrumentes.

## 2 Detektoreichung des NMS-Massenanalysators

### 2.1 Laboreichungen, Aufbereitung der Rohdaten - eine Übersicht

Die folgende Zusammenstellung gibt eine Übersicht über die wichtigsten Etappen bei der Aufbereitung der NMS-Rohdaten. Für Details sei auf das Handbuch "NMS-Eichungen" verwiesen [Schulte, 1989].

#### *Übersicht:*

In diesem Kapitel werden die Detektoreigenschaften beschrieben, so wie sie aus den Laborversuchen bekannt sind. Erst in den Kapiteln 2.2 bis 2.4 werden Detektorkorrekturen diskutiert, die sich nachträglich bei der Analyse der Flugdaten aufdrängen. Die eigentliche Kalibrierung des Fluginstrumentes erfolgte im Toggle-Status 0 mit einem massenaufgelösten  $N_2^+$ -Ionenstrahl bei 700 eV Strahlenergie sowie einem  $N_2$ -Neutralstrahl bei ebenfalls 700 eV Strahlenergie. Aus praktischen Gründen untersuchen wir daher zuerst das Detektorverhalten unter diesen Randbedingungen:

Für den gesamten Detektor bestimmt man einen mittleren Detektorverstärkungsfaktor. Ein relativer Korrekturfaktor als Funktion der Pixelnummer gibt uns anschliessend die Abweichung des lokalen Verstärkungsfaktors vom Mittelwert an. Da sich herausstellte, dass der Verstärkungsfaktor bei hohen Zählraten abnimmt, musste ein zusätzlicher Nichtlinearitäts-Korrekturfaktor eingeführt werden.

Verlässt man das "Eichion"  $N_2^+$  und untersucht auch andere Ionen, so müssen neue Detektorkorrekturen eingeführt werden:

Die Instrumententransmission ändert sich in Abhängigkeit der Ionenmasse und des Toggle-Status. Ein Transmissionskorrekturfaktor gibt die Abweichung der Transmission von der "Standardtransmission" des  $N_2^+$ -Ionenstrahles im Toggle-Status 0 an. Erschwerend für die Auswertung wirkt sich ausserdem der Umstand aus, dass der Detektor für jede Ionensorte leicht verschieden anspricht. Ein weiterer Korrekturfaktor hat deshalb die Aufgabe, für jede Ionensorte die Detektionsempfindlichkeit relativ zur  $N_2^+$ -Empfindlichkeit zu korrigieren.

Sowohl im Ionenmodus wie auch im Neutralmodus interessieren die absoluten Teilchendichten. Getrennt für Ionen und Neutrale wurde eine absolute Empfindlichkeit gemessen. Die absolute Empfindlichkeit ist ein Proportionalitätsfaktor, der die Umrechnung von Detektorzählraten in effektive Dichten erlaubt.

#### *Der mittlere Verstärkungsfaktor des Detektors:*

Die Detektorverstärkung hängt von der MHV-Hochspannung (*Microchannel Plate High Voltage*) ab, die zwischen Vorder- und Rückseite der MCPs angelegt wird. In 15 diskreten

Verstärkungsstufen zwischen hex 1 (Verstärkung ca.  $10^{-2}$ ) bis hex F (Verstärkung ca.  $10^6$ ) kann die MHV-Hochspannung, und damit die Detektorverstärkung (*Gain*) schrittweise erhöht werden. Aufgrund der Eichdaten des Fluginstrumentes wurde für jede einzelne Gain-Stufe *GS* von hex 1 bis hex F ein mittlerer Verstärkungsfaktor  $G_{uni}(GS)$  bestimmt ("*Unified Gain*"). Diese Werte sind in Tabelle 1 zusammengefasst. Der Mittelwert  $G_{uni}(GS)$  setzt sich aus den 16 zentralen Pixel der MCPs Nr. 1 bis Nr. 3 zusammen. Alle Messungen beziehen sich auf einen massenaufgelösten  $N_2^+$ -Ionenstrahl bei 700 eV Strahlenergie. Die Kalibrierung erfolgte mit der nackten Detektoreinheit, losgelöst vom gesamten Instrument.

**Tabelle 1:** Verstärkungsstufen *GS* von hex 6 bis hex F mit zugehöriger MHV-Spannung und entsprechender Verstärkung  $G_{uni}$ .

<i>GS</i> [hex]:	6	7	8	9	A
MHV [V]:	825.3	874.5	930.89	87.0	1050.1
$G_{uni}$ :	$8.830 \cdot 10^1$	$3.026 \cdot 10^2$	$9.650 \cdot 10^2$	$3.290 \cdot 10^3$	$1.037 \cdot 10^4$
<i>GS</i> [hex]:	B	C	D	E	F
MHV [V]:	1183.5	1260.6	1351.7	1470.8	1701.6
$G_{uni}$ :	$3.420 \cdot 10^4$	$1.075 \cdot 10^5$	$3.137 \cdot 10^5$	$8.040 \cdot 10^5$	$2.104 \cdot 10^6$

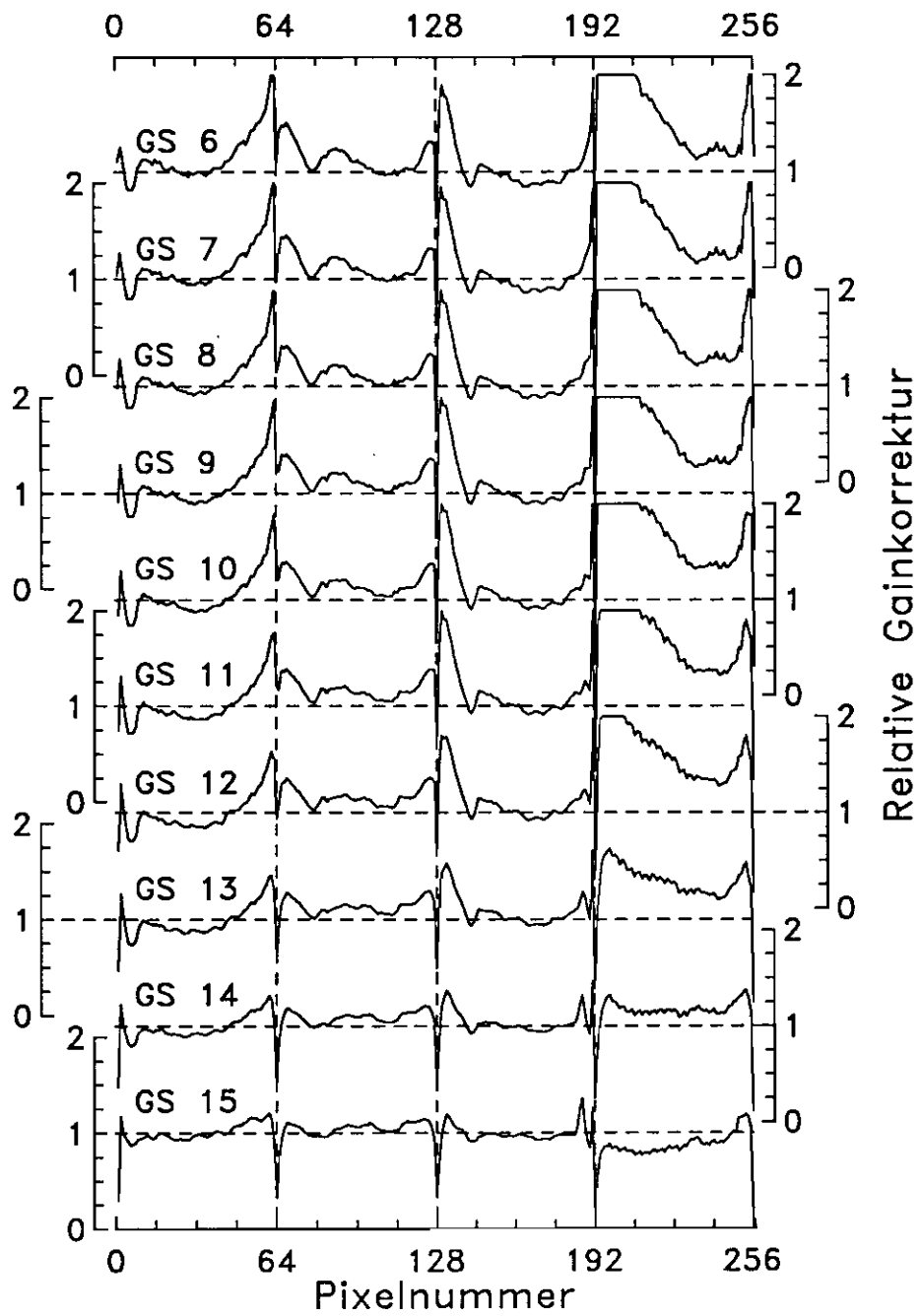
*Relative Korrektur des mittleren Verstärkungsfaktors:*

Jeder MCP-Kanal besitzt im Grunde genommen einen individuellen Verstärkungsfaktor, der vom Durchschnittswert  $G_{uni}(GS)$  abweicht. Man führt deshalb eine relative Gain-Korrektur  $REL(GS,i)$  als Funktion der Verstärkungsstufe *GS* und der Pixelnummer *i* ein. Die relative Gain-Korrektur ist das Verhältnis aus dem effektiven Gain des Pixels *i* und der mittleren Verstärkung  $G_{uni}(GS)$  (Figur 2). Die relative Gain-Korrektur  $REL(GS,i)$  schliesst auch mögliche Unvollkommenheiten der SSACs ein.

*Korrektur der Nichtlinearität:*

Bei einer festen Verstärkungsstufe *GS* erhält jedes Pixel pro Spektrum oder Untergrundspektrum eine sogenannte "A/N-Zählrate"  $A_N$  zugeordnet. Mit Hilfe einer Codierliste können diese  $A_N$ -Werte aus den zur Erde gesandten 8-bit Zahlen berechnet werden. Die den 256 8-bit Zahlen zugeordneten  $A_N$ -Werte sind auf einer logarithmischen Skala von 1 bis 4095 (Vollausschlag) verteilt. Eine " $A_N$ -Einheit" entspricht einer Ladung von  $3.39 \cdot 10^{-14}$  C, welche über die Zeitdauer  $\tau = 62.96$  ms zwischen zwei Detektorauslesungen im Mittel auf dem Pixel akkumuliert wird [Dolder, 1986].

Die Detektorverstärkung ist nicht linear, sondern nimmt mit steigender Zählrate ab. Die Nichtlinearität ist in erster Ordnung proportional zur  $A_N$ -Zählrate und dem Inversen des angelegten MCP-Querstromes  $I_{MCP}(GS,T)$ . Auf zwei unabhängigen Wegen wurden die Korrekturen für die Nichtlinearität aus den Eichdaten abgeleitet. Implementiert wurde schliesslich der von Schulte [1989] entwickelte "*Bern type*"-Gain, der sich im wesentlichen mit der hier nicht verwendeten "*Hodges type*"-Auswertung deckt. Es sei  $G_{uni}(GS)$  die mittlere Detektorverstärkung bei  $A_N = 0$  (so wie in Tabelle 1 aufgeführt). Nach Schulte [1989] lautet dann der effektive Gain  $G_{eff}(GS,i,A_N,T)$  zusammenfassend:



**Figur 2:** Relative Gain-Korrektur  $REL(GS,i)$  als Funktion der Pixelnummer  $i$ . Zu jeder Verstärkungsstufe  $GS$  gehört eine Skala links oder rechts der Figur. Relative Gain-Korrekturen  $REL(GS,i)$  mit Werten über 2 wurden in dieser Figur auf 2 gesetzt.

$$G_{eff}(GS,i,A_N,T) = G_{uni}(GS,i) \cdot REL(GS,i) \cdot \left(1 + \frac{b(i)}{I_{MCP}(GS,T)} \cdot A_N\right) \quad (1)$$

mit

$$NL(GS,i,A_N,T) = \left(1 + \frac{b(i)}{I_{MCP}(GS,T)} \cdot A_N\right) \quad (2)$$

Der effektive Gain  $G_{eff}(GS,i,A_N,T)$  hängt von der Verstärkungsstufe  $GS$ , der Pixelnummer  $i$ , der Zählrate  $A_N$  sowie von der Detektortemperatur  $T$  ab. Der Ausdruck in (2) heisst Nichtlinearitätskorrektur  $NL(GS,i,A_N,T)$ . Der Koeffizient  $b(i)$  kann der Figur 3 entnommen werden. Der MCP-Querstrom  $I_{MCP}(GS,T)$  ist eine Funktion der Detektortemperatur  $T$  und der angelegten Hochspannung  $MHV(GS)$ , welche von der Verstärkungsstufe  $GS$  abhängt.

$$I_{MCP}[\mu A] = \frac{MHV(GS) [V]}{\exp(\alpha_0 + \alpha_1 \cdot T [^{\circ}C])} + \alpha_2 \quad , \quad (3)$$

wobei die Koeffizienten  $\alpha_0$ ,  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  die Werte aus Tabelle 2 annehmen:

Tabelle 2: Koeffizienten zur Gleichung (3) [Schulte, 1989].

$\alpha_0$ :	$\alpha_1$ :	$\alpha_2$ :	MCP Nummer:
5.61909	$-2.1202 \cdot 10^{-2}$	-0.20	1
5.55090	$-2.1806 \cdot 10^{-2}$	-0.30	2
5.66110	$-2.1156 \cdot 10^{-2}$	-0.15	3
5.72501	$-2.2117 \cdot 10^{-2}$	-0.20	4

Der Detektorwiderstand der MCPs sinkt mit steigender Detektortemperatur und zeigt damit Halbleiterwiderständen ähnliches Temperaturverhalten. Bei ungefähr Zimmertemperatur (20° C) beträgt der zugehörige Bandgap zwischen dem Leitungs- und dem Valenzband ~0.4 eV (Figur 4). Die Konstante  $\alpha_2$  in Gleichung (3) erfüllt einzig die Aufgabe einer Offset-Korrektur.

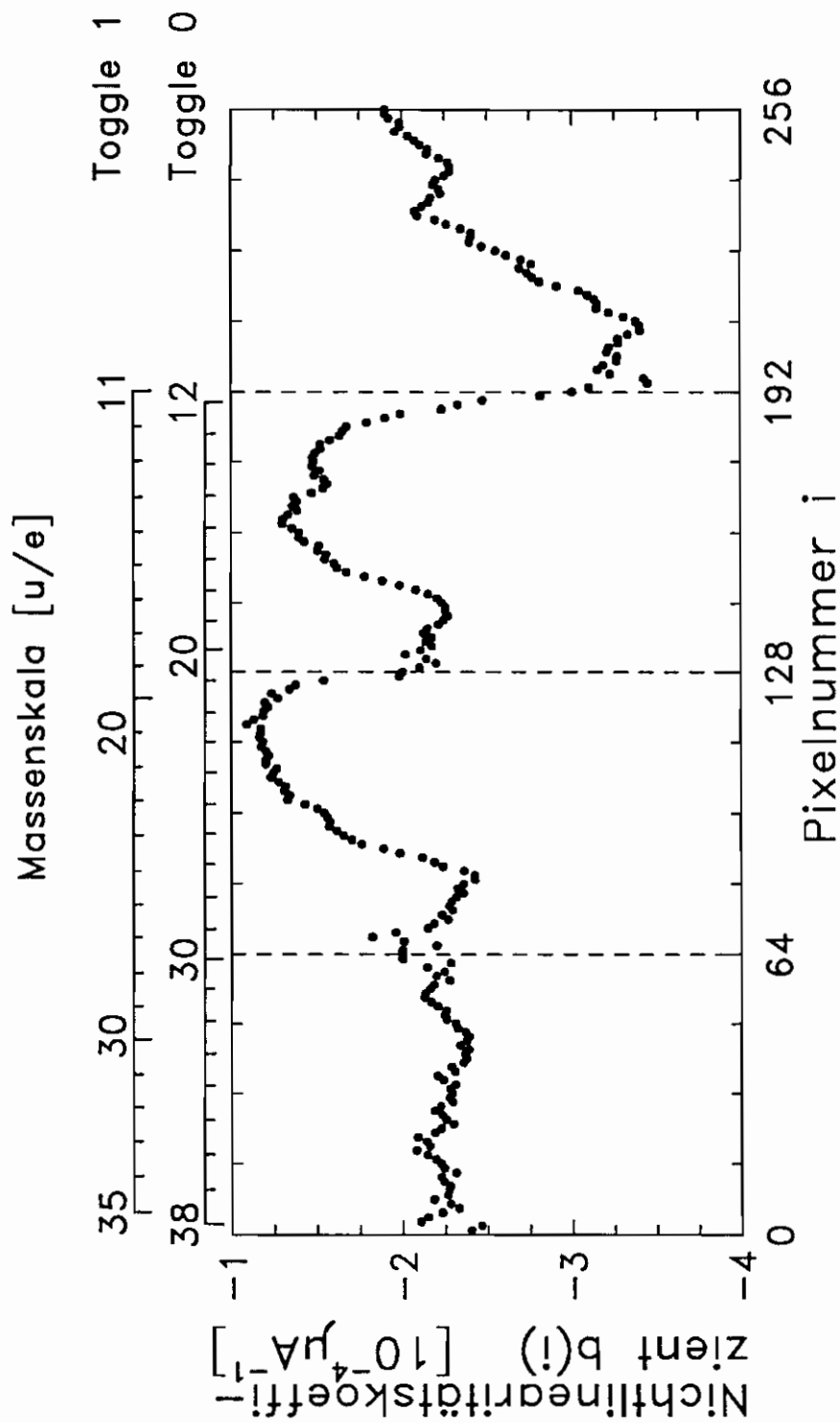
#### Detektoruntergrund:

Im nächsten Schritt muss von jedem Spektrum das zugehörige, gemessene Untergrundspektrum subtrahiert werden. Ionisiertes Restgas im Instrument verursachte ausserdem kleine, nur indirekt nachweisbare Untergrundsignale, welche ebenfalls aus den Daten herausgefiltert wurden [Cadetg, 1990]. Den Rauschuntergrund der SSACs-Anoden im Detektor korrigierte bereits der Bordcomputer.

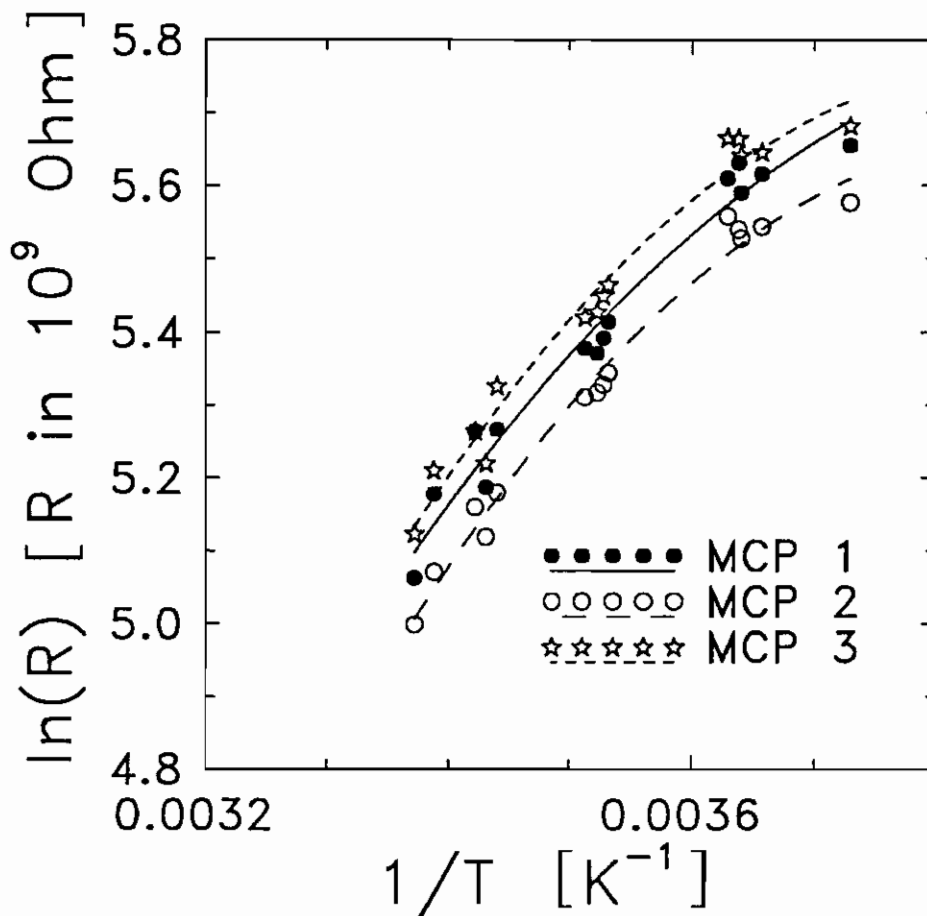
#### Zuordnung der Massenlinien:

In der folgenden Phase müssen die einzelnen Pixels den Massenlinien zugeordnet werden. Ein Programm sucht alle Spektren automatisch oder halbautomatisch nach Massenlinien ab. Bei der uns gegebenen Instrumentenauflösungen hat sich herausgestellt, dass die Integration über die um das Zählratenmaximum liegenden fünf Pixel am genauesten die Zählrate auf der jewei-





**Figur 3:** Nichtlinearitätskoeffizient  $b(i)$  [Schulte, 1989]. Die beiden Massenskalen über der Figur zeigen, wo sich die Massenlinien in den beiden Toggles befinden.



**Figur 4:** Der natürliche Logarithmus des Detektorwiderstandes  $\ln(R)$  als Funktion der inversen Detektortemperatur  $1/T$  für MCP Nr. 1 bis 3. In dieser Darstellung erscheinen Widerstände  $R$  mit der für Halbleiter typischen Temperaturabhängigkeit  $R(T) = R_0 \exp(+\Delta E/2kT)$  als Geraden. Die Geradensteigung ist gleich dem Verhältnis  $\Delta E/2k$ , wobei  $\Delta E$  der Bandgap zwischen dem Leitungs- und dem Valenzband und  $k = 1.3807 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$  die Boltzmann-Konstante ist. Bei  $20^\circ \text{ C}$  beträgt  $\Delta E \approx 0.4 \text{ eV}$ .

ligen Massenlinie wiedergibt. *Schulte* [1989] hat einen speziellen Algorithmus entwickelt, der es erlaubt, Massenlinien voneinander zu trennen, deren Flanken sich überschneiden. Der Algorithmus wurde an künstlich generierten Spektren getestet. Im Idealfall ist der Fehler  $< 1\%$ , im Durchschnitt  $< 3\%$ . Unter extrem ungünstigen Bedingungen, d.h. wenn ein sehr kleines Signal auf der Flanke eines Hauptsignales liegt, kann der Fehler bis auf ca. 4 - 6% ansteigen.

#### *Die absolute Ionenempfindlichkeit:*

Zur Bestimmung von effektiven Gas- und Ionendichten muss die absolute Neutral- und Ionenempfindlichkeit des Instrumentes bekannt sein. Wiederum beschränken wir uns vorerst auf einen  $N_2^+$ -Ionenstrahl bei 700 eV Strahlenergie. Wir definieren  $P(M)$  als über fünf Pixel

integrierte Detektorzählrate auf der Masselinie der Masse  $M$ . Hierbei ist  $P(M)$  die *experimentell* bestimmte, auf die Verstärkungsstufe hex F umgerechnete Zählrate, welche bezüglich Gain und Nichtlinearität korrigiert ist. In der  $P(M)$ -Zählrate wird der Untergrund abgezogen.

$$P(M) = \sum_{\substack{5 \text{ Pixel } i, \\ \text{die zur Masse } M \\ \text{beitragen}}} A_N(i) \cdot \frac{G_{uni}(hex F)}{G_{eff}(GS, i, A_N(i), T)} \quad (3)$$

$G_{uni}(hex F)$  steht für den mittleren Verstärkungsfaktor in der Verstärkungsstufe hex F und  $G_{eff}(GS, i, A_N(i), T)$  für den effektiven Verstärkungsfaktor, wie in Gleichung (1) definiert.  $A_N(i)$  bezeichnet die netto "A/N-Zählrate", in der das Untergrundspektrum und allfällige Beiträge anderer Massen subtrahiert wurden. Falls sich die Verstärkungsstufe des Untergrundspektrums von derjenigen des Spektrums unterscheidet, erfolgt die Auswertung des Termes 3 für das Spektrum und sein zugehöriges Untergrundspektrum getrennt.

Die absolute Ionenempfindlichkeit  $S_{ion}$  stellt den Zusammenhang zwischen der  $P(M)$ -Zählrate und der effektiven Ionendichte  $n(X^+)$  einer bestimmten Ionensorte  $X^+$  her.

$$\frac{P(M)}{k_{rel}(M, Toggle) \cdot Y(X^+, E, MHV)} \cdot S_{ion} = n(X^+) \quad (4)$$

Die beiden Faktoren  $k_{rel}(M, Toggle)$  und  $Y(X^+, E, MHV)$  nehmen bei einem Instrumenten-Toggle 0 und einem  $N_2^+$ -Ionenstrahl bei  $E = 700$  eV Strahlenergie den Wert 1 an, d.h.  $k_{rel}/28 \text{ u/e, Toggle } 0 = 1$  und  $Y(N_2^+, 700 \text{ eV, MHV}) = 1$  (für alle MHV-Spannungen). Beide Faktoren sind notwendig, damit die unter (4) definierte absolute Ionenempfindlichkeit nicht nur für das Eichion  $N_2^+$  sondern auch für beliebige Ionen richtig ist.  $k_{rel}(M, Toggle)$  ist eine Transmissionskorrektur als Funktion der Parameter Masse  $M$  und *Toggle* bei nomineller Energie und nominellem Einfallswinkel (siehe auch Kapitel 2.2).  $Y(X^+, E, MHV)$  ist die relative Detektorempfindlichkeit. Sie berücksichtigt, dass die Ionensorte  $X^+$  und die Einfallsgeschwindigkeit, respektive die entsprechende kinetische Energie  $E$ , den MCP-Verstärkungsfaktor beeinflussen. Die relative Detektorempfindlichkeit ist ausserdem auch von der MHV-Spannung abhängig. Der Faktor  $Y(X^+, E, MHV)$  ist in Kapitel 2.5 erläutert.

Es sei die Anzahl der  $N_2^+$ -Ionen (Strahlenergie 700 eV, Toggle 0) bekannt, die auf den Detektor fallen und zur Masselinie der Masse 28 u/e beitragen. Diese Anzahl dividiert durch die Zahl der  $N_2^+$ -Ionen, die durch den Objektschlitzen strömen, bezeichnen wir als Transmission  $t$ . Es ist zu betonen, dass sich die Definition der Transmission  $t$  ausdrücklich *nur* auf einen  $28^+$ -Ionenstrahl bei 700 eV Strahlenergie und Toggle-Status 0 bezieht. Für andere Massen und Instrumenten-Toggle muss die Transmission  $t$  mit dem Transmissionskorrekturfaktor  $k_{rel}(M, Toggle)$  multipliziert werden.

Für Ionen können wir nun die Ionenempfindlichkeit berechnen, wenn wir die Transmission  $t$  kennen. Experimentell wurde aus dem Verhältnis der Anzahl  $N_2^+$ -Ionen bei 700 eV Strahlenergie, die durch den Eintrittschlitzen des M-Analysators traten, und der Anzahl Ionen, die der Detektor zählte, die Transmission  $t$  bestimmt:

$$S_{ion} = \frac{1}{t \cdot G_{uni}(hex F) \cdot Q \cdot e \cdot A \cdot \tau \cdot v} = 8.05 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-3} \quad (5)$$

wobei

$t = 0.161$	: Transmission von $N_2^+$ , 700 eV, Toggle 0 [Schulte, 1989]
$G_{uni}(hex F) = 2.104 \cdot 10^6$	: Unified Gain bei $GS = hex F$
$Q = 2.95 \cdot 10^{13} \text{ C}^{-1}$	: Absolute Empfindlichkeit
$e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	: Elementarladung
$A = 0.36 \times 5.0 \text{ mm}^2$	: Fläche des Objektschlitzes
$\tau = 62.96 \text{ ms}$	: Integrationszeit [Dolder, 1986]
$v = 68.373 \text{ km/s}$	: Ionengeschwindigkeit relativ zum NMS [Reinhard, 1988]

*Die absolute Neutralempfindlichkeit:*

Analog zu oben verbindet im Neutralmodus  $S_{neut}$  die Grösse  $P(M)$  mit der effektiven Teilchenzahldichte  $n(X)$ . Es gilt:

$$\frac{P(M)}{k_{rel}(M, Toggle) \cdot Y(X_M^+, E, MHV)} \cdot S_{neut}(X, M, IE) = n(X) \quad (6)$$

und

$$S_{neut}(X, M, IE) = S \cdot \frac{\pi \cdot a_0^2}{\sigma_{tot}(X, IE) \cdot \delta(X, M, IE)} \quad (7)$$

$X$  repräsentiert eine bestimmte Sorte von Neutralteilchen.  $X_M^+$  bezeichnet das Ion der Masse  $M$ , welches durch Elektronenstossionisation aus  $X$  entsteht.  $S_{neut}(X, M, IE)$  ist die Neutralempfindlichkeit, wenn Ionen der neutralen Spezies  $X$  bei einer Elektronenenergie  $IE$  die Massenlinie  $M$  erzeugen. Als  $\sigma_{tot}(X, IE)$  bezeichnen wir den totalen Stossionisationsquerschnitt für Teilchen der Sorte  $X$  bei einer Elektronenenergie  $IE$ . Der totale Ionisationsquerschnitt  $\sigma_{tot}(X, IE)$  wird in Einheiten von  $\pi a_0^2$  ( $= 8.80 \cdot 10^{-17} \text{ cm}^2$ ) angegeben, wobei  $a_0$  der Bohr'sche Radius ist. Der Faktor  $\delta(X, M, IE)$  beschreibt den Anteil der insgesamt aus  $X$  produzierten Ionen, die zur Masse  $M$  beitragen. Die universelle Konstante  $S$  wurde mit Hilfe eines pyroelektrischen Detektors für die beiden Elektronenenergien bei  $\sim 18 \text{ eV}$  (*LeV-Modus*) und  $\sim 90 \text{ eV}$  (*HeV-Modus*) bestimmt. Sie lauten [Schulte, 1989]:

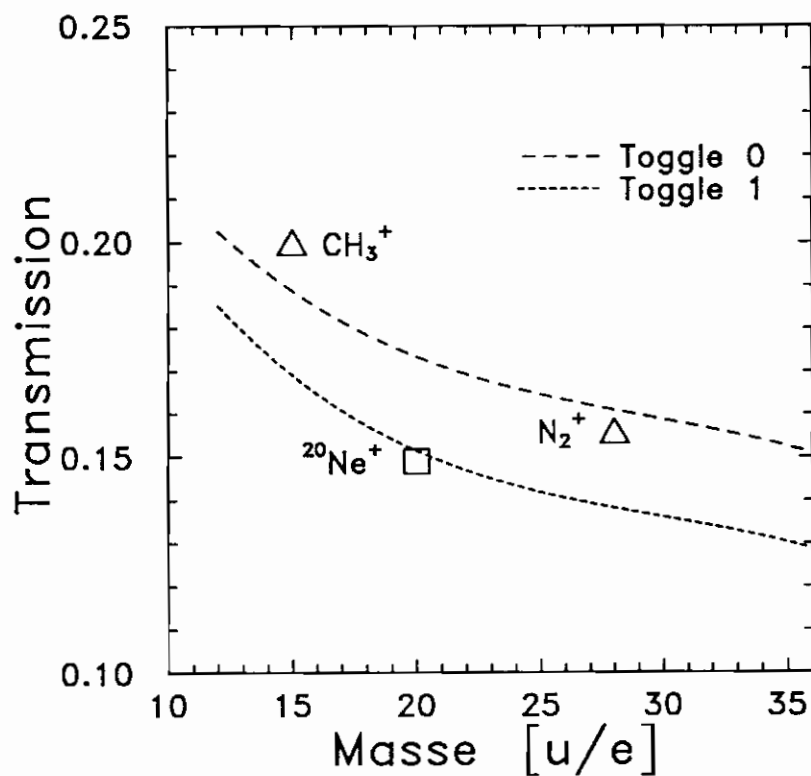
$$\begin{aligned} S \text{ im HeV-Modus: } & S_{HeV} = 230 \text{ cm}^{-3} \\ S \text{ im LeV-Modus: } & S_{LeV} = 352 \text{ cm}^{-3} \end{aligned}$$

## 2.2 Transmission

Für die folgende Diskussion wird ein homogener, senkrecht zur Objektschlitzfläche des NMS einfallender Ionenstrahl vorausgesetzt. Die Energie betrage nominelle 25 eV pro Nukleon. Als Transmission wird - analog wie im vorangehenden Kapitel die  $N_2^+$ -Transmission  $t$  definiert

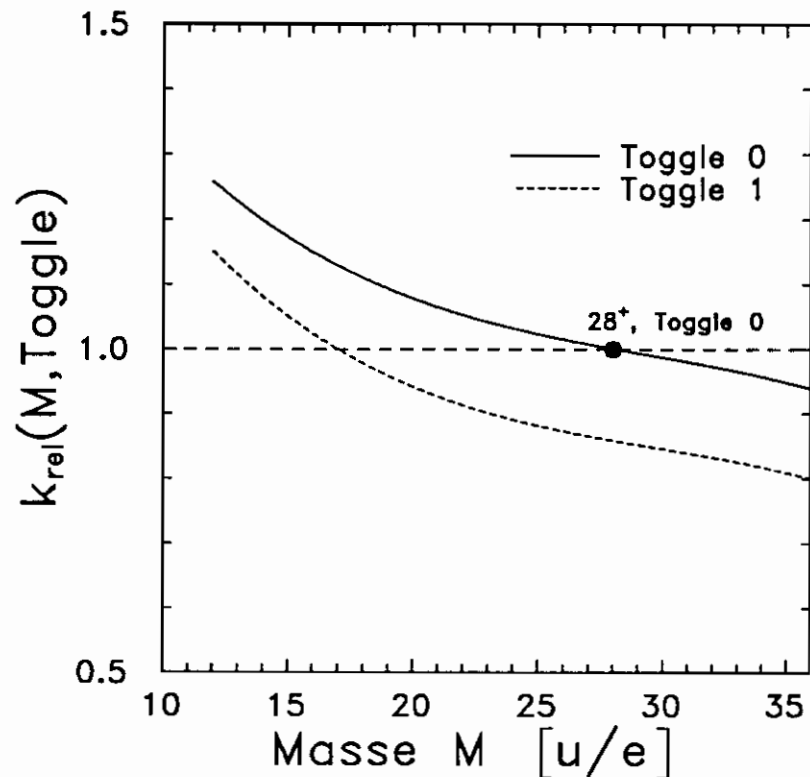
wurde - wiederum das Verhältnis der Anzahl Ionen der Masse  $M$ , die auf dem Detektor zur Masselinie  $M$  beitragen, relativ zur Anzahl Ionen der Masse  $M$ , die durch den Objektschlitz eintraten, verstanden.

Unter den oben aufgeführten Bedingungen schränkt einzig die Detektorhöhe von 5 mm die Transmission ein. Die  $\beta$ -Fokussierung senkrecht zur Magnetebene reicht nicht aus, die Ionenstrahlen in  $\beta$ -Richtung genügend stark zu fokussieren, so dass der Eintrittsschlitz vollständig auf den Detektor abgebildet wird. Die Transmission nimmt deshalb für grosse Massen infolge der längeren Flugbahnen im Instrument ab. Auch der Toggle-Zustand beeinflusst die Transmission. Simulationen zeigen, dass die Transmission im Toggle-Zustand 1  $\sim 10\%$  geringer ist als im Toggle-Zustand 0. *Cadetg* [1990] hat mit Hilfe von Bahnrechnungen die Transmission für beide Toggle-Zustände berechnet. Die Transmissionsverluste durch das Kreuzgitter am Ende des Parallelplattenanalysators wurden ebenfalls berücksichtigt (Gitterabstand: 0.2 mm; Durchmesser eines Gitterstabes: 25  $\mu\text{m}$  [Dolder, 1986]). Bei einem schrägen Teilchenbeschuss unter einem Winkel von  $45^\circ$  beträgt die geometrische Transmission dieses Gitters  $\sim 65\%$ . Innerhalb der Rechengenauigkeit waren keine Unterschiede zwischen Ionen und Neutralteilchen erkennbar. Labordaten des Fluginstrumentes erlaubten es, die Transmission zumindest punktuell auch experimentell zu überprüfen. In Figur 5 sind im



Figur 5: Transmission  $t \cdot k_{rel}(M, Toggle)$  als Funktion der Masse  $M$  und des Toggle-Zustandes. Die eingetragenen Kurven stellen die gerechnete Transmission im Toggle-Status 0 beziehungsweise Toggle-Status 1 dar. Aufgeführt sind ebenfalls die während der Eichphase des Fluginstrumentes gemessenen Transmissionen von  $\text{CH}_3^+$ ,  $\text{N}_2^+$  (Toggle 0) und  $^{20}\text{Ne}^+$  (Toggle 1).

Toggle-Status 0 für  $\text{CH}_3^+$  und  $\text{N}_2^+$ , und im Toggle-Status 1  $^{20}\text{Ne}^+$  eingezeichnet. Da die Kalibrierung des NMS hauptsächlich mit  $\text{N}_2^+$ -Ionen im Toggle-Status 0 erfolgte, wird für die Datenauswertung die auf molekularen Stickstoff normierte Transmissionskorrektur  $k_{\text{rel}}(M, \text{Toggle})$  eingeführt (Siehe Figur 6).



**Figur 6:** Transmissionskorrektur  $k_{\text{rel}}(M, \text{Toggle})$  als Funktion der Masse  $M$  und des Toggle-Zustandes, dargestellt über den ganzen Massenbereich des M-Analysators. Die Transmissionskorrektur kann mit Polynomen dritten Grades approximiert werden:

$$k_{\text{rel}}(M, \text{Toggle } 0) = -2.873 \cdot 10^{-5} M^3 + 2.532 \cdot 10^{-3} M^2 - 8.109 \cdot 10^{-2} M + 1.9166$$

$$k_{\text{rel}}(M, \text{Toggle } 1) = -3.368 \cdot 10^{-5} M^3 + 3.012 \cdot 10^{-3} M^2 - 9.616 \cdot 10^{-2} M + 1.9293$$

Während des Vorbeifluges am Kometen P/Halley gelten die Umrechnungsfaktoren von der Masse  $M$  in Pixelnummern  $i$  des Detektors:

$$\text{Toggle } 0: M = 38.75 - 0.1409 \cdot i$$

$$\text{Toggle } 1: M = 35.70 - 0.1288 \cdot i$$

### 2.3 Der "Toggle-Effekt"

Wie bereits erwähnt, kann das Spektrum mit einer diskreten Änderung der Ablenkspannung des Parallelplattenanalysators um ca. 2 Masseneinheiten gegen die tieferen Massen hin verschoben werden. Das verschobene Spektrum heisst Toggle-1-Spektrum, das unverschobene Toggle-0-Spektrum.

Bei zwei zeitlich aufeinanderfolgenden Flugspektren seien sämtliche bis anhin aufgezählten Detektor- und Instrumentenkorrekturen vorgenommen worden. Das eine Spektrum sei im Toggle-Status 0 aufgenommen worden, das andere im Toggle-Status 1. Dann sollten die beiden Spektren übereinander gelegt zusammenfallen. Die Auswertung der Flugdaten zeigt aber, dass sich die Signalstärken in den beiden Toggles in vielen Fällen systematisch unterscheiden. Dieser Effekt wird im folgenden "*Toggle-Effekt*" genannt. Als Toggle-Verhältnis einer Massenlinie  $M$  wird das Verhältnis der Zählrate auf der Masse  $M$  in Toggle 0 relativ zur Zählrate auf der Masse  $M$  im Toggle 1 bezeichnet.

Während des Fluges durch die Koma von P/Halley wurden bis auf 13 Spektren sämtliche HeV-Neutralspektren in der höchsten Verstärkungsstufe hex F aufgenommen (von den 13 verbleibenden Spektren im HeV-Modus waren die Verstärkungsstufen:  $1 \times$  hex B,  $3 \times$  hex C,  $3 \times$  hex D,  $6 \times$  hex E). Für die Neutralspektren wurde deshalb der Toggle-Effekt in der Verstärkungsstufe hex F als Funktion der Masse  $M$  bestimmt. Ebenso wurde für die Ionenspektren nahe am Kometen der Toggle-Effekt in den Verstärkungsstufen hex 6, hex 7 und hex 8 ermittelt (Figur 7).

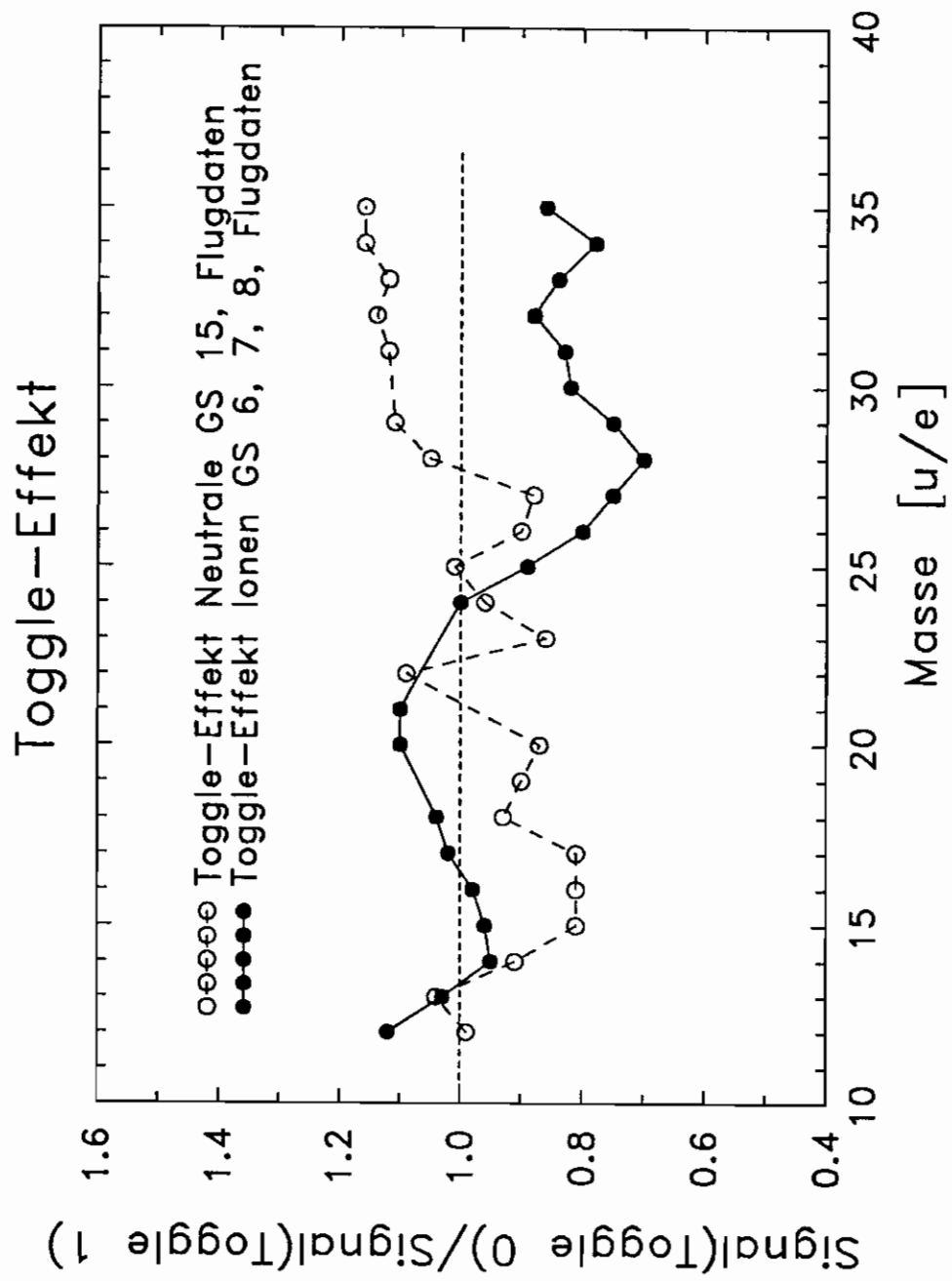
Im wesentlichen gibt es zwei Erklärungen für den beobachteten Toggle-Effekt.

- (1) Die ortsabhängige Verstärkung der MCPs hat sich zwischen der Eichphase im Labor und den Messungen im Flug verändert. Das NMS bildet eine Massenlinie je nach Toggle-Wert auf zwei verschiedene Detektorstellen ab. Wenn sich das Verhältnis der Verstärkungsfaktoren zwischen diesen beiden Stellen auf dem Detektor gegenüber der Kalibrierung ändert, entsteht für die betrachtete Massenlinie eine vom Toggle abhängige Zählrate. Basierend auf dieser Interpretation kann man die gemessenen Toggle-Effekte mit revidierten ortsabhängigen Verstärkungsfaktoren korrigieren.

Die Toggle-Verhältnisse liegen zum Teil über grosse Massenbereiche entweder tendenziell immer unterhalb oder tendenziell immer oberhalb des Idealwertes 1. Da die Detektorkorrekturfaktoren kumulativ aus den Toggle-Verhältnissen hervorgehen, entstehen dadurch zum Teil extreme Korrekturfaktoren. Im Neutralmodus des NMS treten sogar innerhalb des gleichen MCPs Korrekturfaktoren von 0.5 bis 1.2 auf, die die *geeichten* Detektorplatten korrigieren sollen. Im Ionenmodus ist die Situation noch extremer.

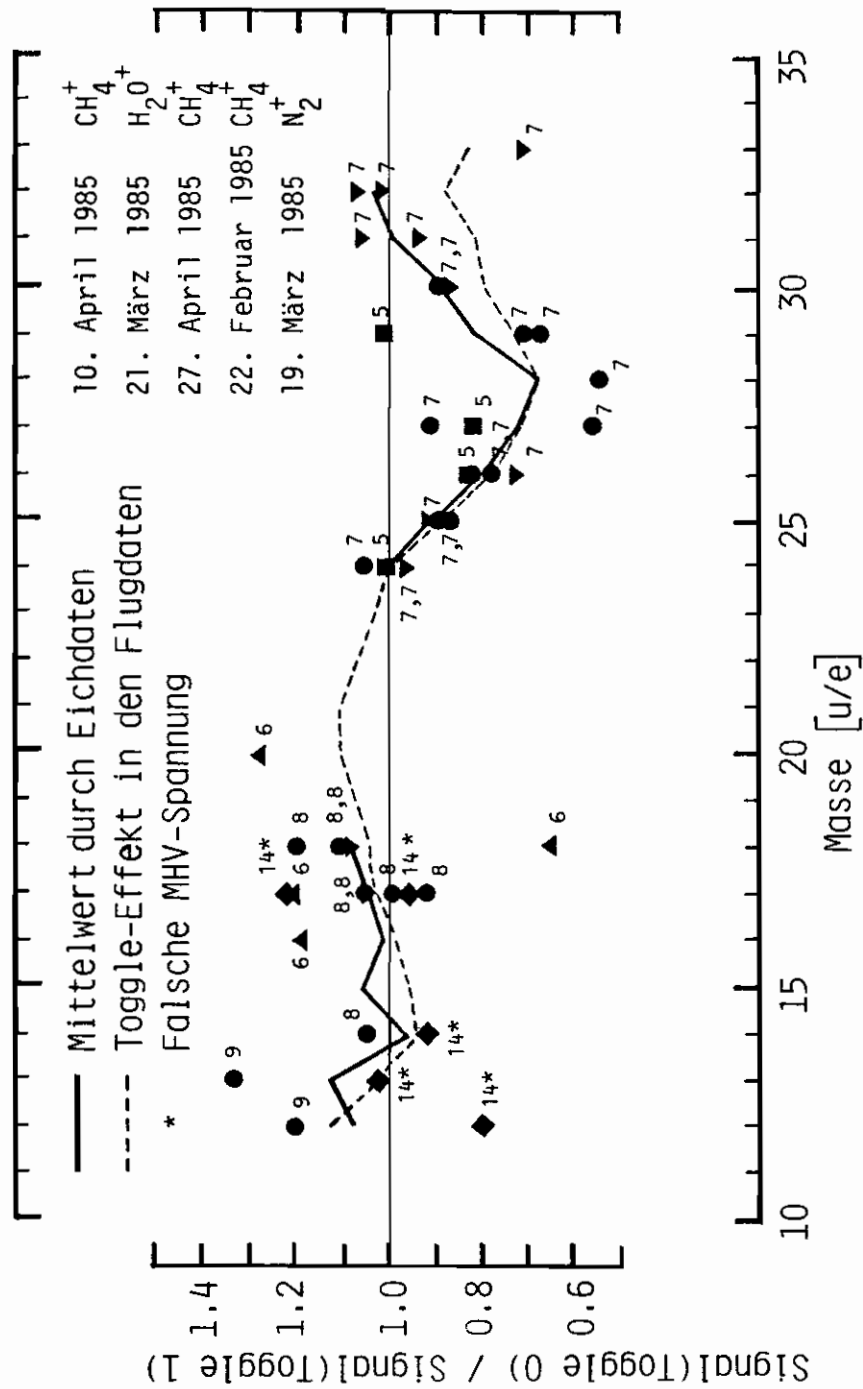
Derartige lokale Veränderungen gegenüber der Eichung innerhalb eines MCPs sind eher unwahrscheinlich. Ausserdem würden diese massiven Detektorkorrekturen die Neutralmassenspektren in der Wasserregion (Massen 16 u/e bis 21 u/e) nicht interpretierbar verstellen. Nach eingehender Untersuchung wurde die Idee fallen gelassen, den Toggle-Effekt auf ein reines Verstärkungsproblem des Detektors zurückzuführen.

- (2) Die Eichung der positionsabhängigen Verstärkung erfolgte nur mit der Detektoreinheit alleine ausserhalb des Gesamtinstrumentes. Die beiden Gitter vor dem Detektor können die Instrumententransmission praktisch unnachvollziehbar lokal beeinflussen. Die Gittermaschen übernehmen die Funktion von kleinen Sammelrespektive Zerstreulinsen. Sie können so eine ortsabhängige Modulation der Signalstärke auf dem Detektor bewirken. Wenn der Toggle-Effekt tatsächlich ein Gittereffekt ist, dann sollte er bereits während den Labormessungen mit dem kompletten Instrument vorhanden gewesen sein. Sämtliche verfügbaren Labordaten sind auf Toggle-Effekte hin untersucht



Figur 7: Der Toggle-Effekt: Als Funktion der Masse  $M$  ist das Verhältnis aus der Zählrate auf der Masse  $M$  im Toggle 0 relativ zur Zählrate auf der Masse  $M$  im Toggle 1 dargestellt. Die offenen Kreise symbolisieren Neutralmessungen und die fetten Kreise Ionenmessungen.





**Figur 8:** Der Toggle-Effekt in den Labordaten: Dargestellt ist das Verhältnis zwischen der Zählrate auf der Masse  $M$  im Toggle-Status 0 und der Zählrate auf derselben Masse im Toggle-Status 1. Die Zahlen neben den Datenpunkten geben die zugehörige Verstärkungsstufe GS an. Die durchbrochene Kurve zeigt den Toggle-Effekt der Ionen, wie er aus den Flugdaten abgeleitet wurde. Die ausgezogene Kurve entstand durch Mittelung aller Datenpunkte gleicher Masse  $M$ . In der Darstellung sind der Übersicht halber nur die Hälfte aller Datenpunkte eingetragen (nur HG-Daten).

worden. Abgesehen von einer relativ grossen Streuung zeigen die Ionenspektren der Eichung tatsächlich das gleiche Toggle-Verhalten wie die entsprechenden Flugdaten (Figur 8).

Der Toggle-Effekt wird in der weiteren Datenauswertung als Gittereffekt interpretiert. Sowohl für die Ionen wie auch die Neutralen wird je ein von der Masse abhängiger Korrekturfaktor eingeführt. Die Toggle-Korrektur setzen wir in erster Näherung unabhängig von der Verstärkungsstufe des Detektors. Dies ist möglich, da die Toggle-Korrekturfaktoren für Ionen in den Verstärkungsstufen hex 6 bis hex 8 praktisch gleich sind. Für Neutralmessungen muss eine separate Toggle-Korrektur eingeführt werden. Die Neutralen wurden fast ausschliesslich in der Verstärkungsstufe hex F aufgenommen, d.h. bei einer MHV-Spannung, die, verglichen mit den Ionenmessungen in den Verstärkungsstufen hex 6 bis hex 8, ein deutlich anderes Fokussierungsverhalten des Detektors bewirkt.

Es gibt keinen Grund, die Messungen im Toggle-Status 0 den Messungen im Toggle-Status 1 vorzuziehen oder zu benachteiligen. Deshalb wurden die Messwerte gemittelt.

Bei Verstärkungsstufen grösser als hex 12 bleibt in den Ionenspektren trotz der schon starken Streuung ein leichter Toggle-Effekt übrig. Da die Iontemperatur in den entsprechenden Distanzen (ca.  $10^5$  km) um ein Vielfaches höher ist als nahe am Kometen, werden auch die Massenlinien entsprechend breiter. Damit verändert sich ebenfalls die vom Toggle abhängige Transmission. Ausserdem verhält sich der Gittereffekt bei den, verglichen mit den Verstärkungsstufen hex 6 - hex 8, deutlich höheren MHV-Spannungen anders als in den Messungen nahe am Kometenkern. In den Ionenspektren fällt speziell die Massenlinie 12 u/e ab ca. 60'000 km durch einen grossen Toggle-Effekt auf. Wahrscheinlich entsteht dieser durch einen Abschneideeffekt im Instrument. In dieser Arbeit wird jedoch der angesprochene Distanzbereich nicht verwendet.

## 2.4 Spektrenvergleich bei verschiedenen Verstärkungsstufen des Detektors während des Fluges

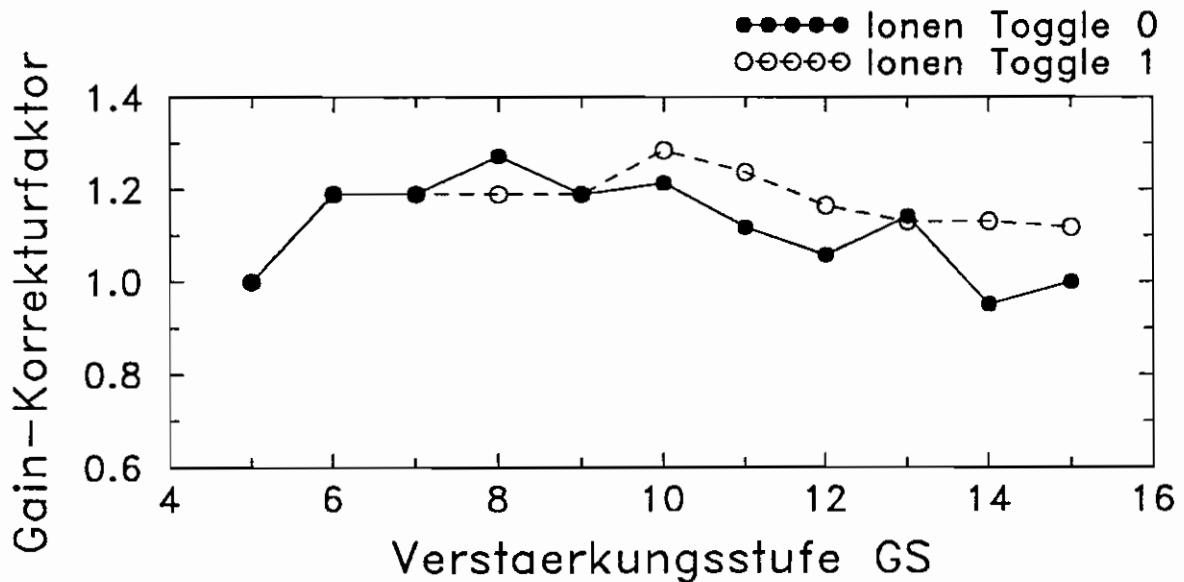
Das NMS wählt automatisch die passende Verstärkungsstufe zwischen hex 1 und hex F. Die Wahl erfolgt auf Grund des höchsten Signales auf den MCPs Nr. 1 bis 3. Bei jedem zweiten Spektrum erhöht das NMS die Verstärkungsstufe um drei hex-Werte gegenüber der Grundeinstellung. Die Signale werden dadurch um einen Faktor  $\sim 36$  vergrössert [Dolder, 1986]. Es lassen sich so auch Signale messen, die gegenüber dem Hauptsignal klein sind. Das unvergrösserte Spektrum wird als GS-Spektrum (*Gain Step Spektrum*) bezeichnet. Das bei höherer MHV-Spannung der MCPs aufgenommene, vergrösserte Spektrum nennen wir HG-Spektrum (*High Gain Spektrum*). Falls sich das Instrument in der Verstärkungsstufe hex D, hex E oder hex F befindet, wird es natürlich lediglich um die verbleibenden Stufen auf hex F gesetzt.

Von allen verfügbaren Flugdaten werden die GS- und HG-Ionenspektren bei jeder auswertbaren Massenlinie verglichen. Man betrachtet das Verhältnis der Signalstärken auf der Masse  $M$  zweier zeitlich aufeinanderfolgenden Spektren, von denen das eine in der GS- und das andere in der HG-Betriebsart aufgezeichnet wurde. Das Verhältnis erhält die Bezeichnung

GS/HG-Verhältnis. Man beschränkt sich darauf, für jede vorkommende GS/HG-Kombination in jedem auftretenden Toggle ein *massenunabhängiges* mittleres GS/HG-Verhältnis zu bestimmen. Es ist in zweierlei Hinsicht sinnvoll, die GS/HG-Verhältnisse unabhängig von der Masse zu analysieren: Einerseits nimmt die Streuung der Verhältnisse mit zunehmender Distanz und damit steigender Verstärkungsstufe zu; die beobachteten massenabhängigen Variationen liegen dann im Bereich der Streuung. Andererseits sind die massenabhängigen Schwankungen der GS/HG-Verhältnisse bei einem vorgegebenen Toggle-Status und einer festgehaltenen Verstärkungsstufe verglichen mit den Unterschieden zwischen den Mittelwerten verschiedener Verstärkungsstufen klein.

Die beobachteten Abweichungen vom GS/HG-Verhältnis = 1 entstehen dadurch, dass sich die mittleren Gains der verschiedenen Verstärkungsstufen seit der Eichung leicht verändert haben. Aus den gemessenen GS/HG-Verhältnissen wird eine vom Toggle abhängige Gain-Korrektur für jede Verstärkungsstufe zwischen hex 6 bis hex F abgeleitet. Die Gain-Korrektur multipliziert mit dem geeichten Gain setzt die GS/HG-Verhältnisse auf eins. Die Korrekturfaktoren sind in der Größenordnung von 20%.

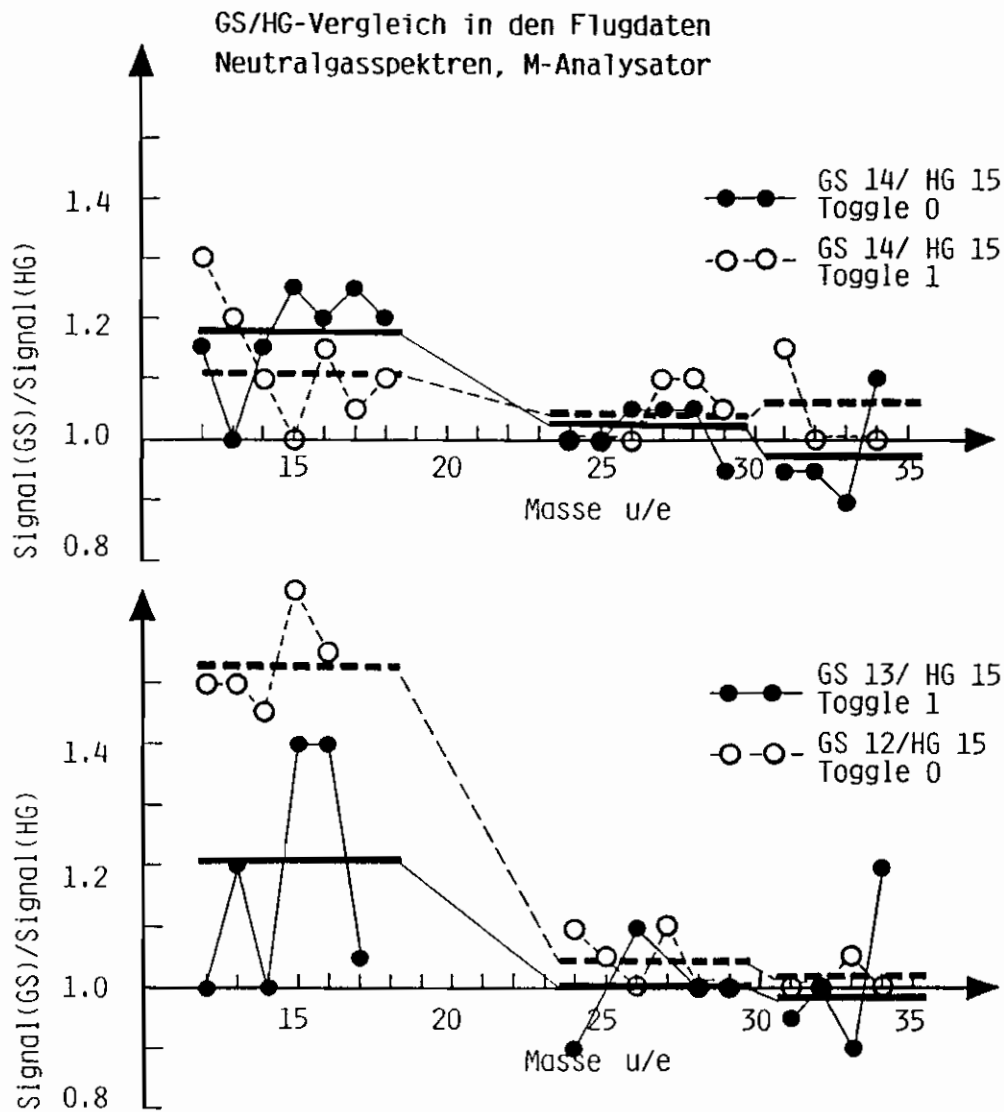
Aus den GS/HG-Verhältnissen sind nur noch *relative* Gain-Verschiebungen feststellbar. Die Korrekturen wurden auf die Verstärkungsstufe hex F und den Instrumenten-Toggle 0 normiert (Figur 9).



**Figur 9:** Gain-Korrekturfaktoren für Ionendaten, abgeleitet aus den GS/HG-Verhältnissen in den Flugdaten. Der Gain-Korrekturfaktor multipliziert mit dem geeichten  $G_{uni}(GS,Toggle)$  ergibt den effektiven mittleren Verstärkungsfaktor während dem Halley-Vorbeiflug.

Auch aus den Neutraldaten konnten GS/HG-Verhältnisse abgeleitet werden. Dabei beschränkte man sich auf diejenigen Spektren, in denen die Stossionisation mit 90 eV Elektronen erfolgte (Figur 10). Es fällt auf, dass sich das MCP Nr. 3 anders verhält als die beiden übrigen MCPs Nr. 1 und 2. Im Neutralmodus des NMS M-Analysators stellte *Eberhardt* [1991] auch in den Untergrundspektren der Flugdaten die gleiche Anomalie für das MCP Nr. 3 fest.

Im Neutralmodus musste das NMS erst ab kometozentrischen Distanzen unter ca. 7500 km Verstärkungsstufen unter hex F einsetzen. Da die genaue Ursache des Fehlverhaltens von MCP Nr. 3 bei Verstärkungsstufen unter hex F nicht abgeklärt werden konnte, schliessen wir vorderhand die Neutraldaten bei Distanzen  $R < 7500$  km aus.



**Figur 10:** GS/HG-Verhältnisse, abgeleitet aus den Neutraldaten. Mit dicken Balken sind die Mittelwerte der einzelnen MCPs angegeben. Während MCP Nr. 1 und 2 mit eins verträgliche GS/HG-Verhältnisse aufweisen, weicht MCP Nr. 3 deutlich von eins ab.

## 2.5 Einfluss der Projektilstruktur und Projektilgeschwindigkeit auf die MCP-Verstärkung

### 2.5.1 Zur Literatur über die ioneninduzierte kinetische Elektronenemission an Metalloberflächen

Die Detektion eines Ions in einem Kanal der Microchannel Plates erfolgt grob in zwei Stufen:

- (1) Bei der Primärkollision schlägt das einfallende Ion aus der Wandung eines MCP-Röhrchens Sekundärelektronen heraus. Die MCPs sind auf der Vorder- und Rückseite mit einer leitenden Nickel-Chrom-Legierung beschichtet. Ein Teil der Ionen prallt auf diese metallisierte Oberfläche zwischen den Röhrchen. Die dabei entstehenden Sekundärelektronen gehen nicht verloren, sondern werden durch das vorgelagerte *Repeller*-Gitter ebenfalls in die MCP-Röhrchen gelenkt.
- (2) Die Sekundärelektronen werden durch den Potentialanstieg entlang des MCP-Röhrchens gegen die MCP-Rückseite hin beschleunigt. Nach einer gewissen Flugzeit prallen sie wiederum auf die Kanalwand. Je nach angelegter Hochspannung zwischen der MCP-Frontseite und Hinterseite, der Bauart der MCPs, dem Auftreffort im Kanal, der Anzahl produzierter Sekundärelektronen bei der Primärkollision, etc., erzeugen die Elektronen bei jedem solchen Wandkontakt neue Elektronen.

In einem idealen MCP-Kanal wäre die Anzahl der Elektronen am Ende des Kanales proportional zu der bei der Primärkollision erzeugten. Steigt jedoch während der Elektronenkaskade die Elektronendichte stark an, so werden die Elektronen durch ihr eigenes elektrisches Raumladungsfeld abgebremst. Dadurch sinkt ihre kinetische Energie und damit auch die Sekundärelektronenausbeute in den folgenden Wandstößen. Die Proportionalität zwischen der Zahl der Elektronen aus dem ersten Stoss und dem Ausgangssignal am Ende des MCP-Kanales geht dadurch ebenfalls verloren. Im Extremfall, d.h. bei vollständiger Kanalsättigung, vergisst das MCP das Primäreignis und liefert pro Ion einen vom Projektil mehr oder weniger unabhängigen Puls (Die Wahrscheinlichkeit, *kein* Ion zu messen, ist aber selbst bei vollständiger Sättigung nicht Null; je weniger Sekundärelektronen ein Ion auslöst, desto grösser ist der Anteil der nicht gezählten Ionen).

Die NMS Microchannel Plates werden mit MCP-Hochspannungen betrieben, bei denen bei Spannungen unterhalb ~1200 V nicht feststellbare, im Bereich zwischen 1200 V und 1700 V messbare Sättigungseffekte zu erwarten sind. Will man einen Projektil-spezifischen MCP-Gain ermitteln, so muss man die bei der Primärkollision produzierte Zahl Elektronen und das Verstärkungsverhalten der MCPs unter den vorgegebenen Randbedingungen kennen. In diesem Kapitel soll deshalb kurz auf die Literatur zur Sekundärelektronenproduktion bei Ionenbeschuss eines Festkörpers eingegangen werden. Die meisten Autoren untersuchten als Festkörper Metalle. Ausführliche Informationen über Microchannel Plates findet man bei *Timothy* [1981] und *Wiza* [1979].

Ein Ion, das auf eine Festkörperoberfläche zufliegt, besitzt einerseits infolge seiner Relativgeschwindigkeit zum Target eine *kinetische* Energie und andererseits eine *potentielle*

Energie in Form seiner Ionisierungsenergie. Ein langsames Projektilion kann vor Erreichen der Festkörperoberfläche neutralisiert werden. Dabei setzt das Projektilion seine überschüssige potentielle Energie frei, indem es ein Elektron aus dem Leitungsband des Targets herauslöst. Dieser Prozess wird als *potentielle Elektronenemission* bezeichnet. Er kann theoretisch gut beschrieben werden [Hagstrum, 1954; Kishinevskii, 1973]. Gemäss Kishinevskii [1973] gilt für die Ausbeute durch potentielle Elektronenemission:

$$\gamma_p = \frac{P_1}{E_f} \cdot (P_2 \cdot E_i - 2W_a) \quad (8)$$

wobei

$\gamma_p$ : Zahl der Elektronen  
 $E_i$ : Ionisierungsenergie  
 $E_f$ : Fermienergie  
 $W_a$ : Austrittsarbeit für Elektronen

$P_1$  und  $P_2$  sind zwei Konstanten, die gemäss Kishinevskii universelle Werte zwischen 0.2 und 0.8 annehmen.

Für unsere Zwecke wesentlich bedeutsamer ist die sogenannte *kinetische Elektronenemission*: Das Projektilion gibt seine kinetische Energie über inelastische Stösse mit Festkörperatomen ab. Dabei schlägt es Elektronen aus der Targetoberfläche heraus. Im Gegensatz zur potentiellen Sekundärelektronenemission gibt es zur kinetischen Sekundärelektronenemission keine geschlossene Theorie. Auch die experimentellen Daten vermitteln kein lückenloses, einheitliches Bild. Eine experimentelle Schwierigkeit ist sicher die Vielzahl der Parameter, die untersucht werden muss. So fließen in die Sekundärelektronenausbeute nicht nur die Projektilparameter ein, wie Geschwindigkeit, Einfallswinkel, Masse und Struktur, sondern auch Targetparameter, wie chemische Zusammensetzung, Oberflächenstruktur, Kristallstruktur und Oberflächenzusammensetzung. Es stellte sich auch heraus, dass Oberflächenverschmutzungen die Messresultate stark beeinflussen können [Ferguson, 1988].

Es soll hier kurz auf Arbeiten dreier Autorengruppen eingegangen werden, auf welche wir in späteren Kapiteln nochmals zurückgreifen werden:

*Beuhler R. J., Friedman L.:*

*Beuhler und Friedman* [1977a, 1977b] untersuchten unter anderem auch die Elektronenausbeute beim Beschuss einer polierten Kupfer-Oberfläche mit mehratomigen Ionen. Das mehratomige Ion bestehe aus  $i$  verschiedenen, in der Strukturformel des Ions  $n_i$  mal auftretenden Atomen. Im Mittel erzeuge ein Molekülion  $\gamma_m$  Sekundärelektronen und ein einzelnes atomares Ion  $\gamma_i$  Sekundärelektronen. Aus einer limitierten Zahl von gemessenen mehratomigen Projektilionen schlossen *Beuhler und Friedman*, dass die  $\gamma_m$  als additive Überlagerung der  $\gamma_i$  aufgefasst werden dürfen:

$$\gamma_m = \sum_{\text{Atomsorte } i} n_i \cdot \gamma_{iv} (v [\text{cms}^{-1}] - 4.5 \cdot 10^6 [\text{cms}^{-1}]) \cdot 2.69 \cdot 10^{-4} [\text{cms}^{-1}] \quad (9)$$

Die  $\gamma_{iv}$ -Werte beziehen sich auf eine Projektilgeschwindigkeit  $v = 4.17 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$ . Die Elektronenproduktion hängt linear von der Projektilgeschwindigkeit  $v$  ab, mit einer für alle Projektile gemeinsamen, scheinbaren, d.h. linear extrapolierten Schwellengeschwindigkeit von  $4.5 \cdot 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ . Für einige Atome geben *Beuhler und Friedman* [1977a] die  $\gamma_{iv}$  an. So für Wasserstoff  $\gamma_H = 0.45$ , Kohlenstoff  $\gamma_C = 2.15$ , Stickstoff  $\gamma_N = 2.37$ , Sauerstoff  $\gamma_O = 2.37$ , Argon  $\gamma_{Ar} = 4.1$  und Xenon  $\gamma_{Xe} = 7.8$ .

Die gleichen Autoren [*Beuhler und Friedman*, 1980] haben im speziellen auch Wasser-Clusters betrachtet. Sie leiteten aus unterschiedlich grossen  $\text{H}_2\text{O}$ -Clusters eine universelle  $\text{H}_2\text{O}$ -Elektronenausbeute  $\gamma_{\text{H}_2\text{O}}$  als Funktion der Aufprallgeschwindigkeit ab. Auch in diesem Falle ist die  $\gamma$ -Kurve als Funktion der Projektilgeschwindigkeit linear, läuft aber in der Gegend der Schwellengeschwindigkeit flach aus.

*Beuhler* [1983] argumentiert, dass bei Channeltrons und Microchannel Plates über der Bleiglas-Matrix eine ca.  $100 \text{ \AA}$  dicke  $\text{SiO}_2$ -Schicht liegt. Es sei deshalb angebracht, die Sekundärelektronen-Produktion an Metallflächen zu analysieren, die mit einer dünnwandigen Oxidschicht bedeckt sind. Aus Experimenten mit Wasser-Clusterionen als Projektile und Aluminium mit einer  $\sim 1000 \text{ \AA}$  dicken  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Schicht als Target folgt, dass die zuvor bei Cu-Targets beobachtete Additivität der  $\gamma_i$  verletzt wird [*Beuhler*, 1983]. Die Elektronenproduktion des gesamten Projektils  $\gamma_m$  ist kleiner als die aus den einzelnen, zum Projektil beitragenden  $\gamma_i$  zusammengezählt ergeben. Die Abweichung vom Sollwert nimmt ausserdem mit zunehmend produzierter Elektronenzahl ab. *Beuhler* [1983] führt diese Beobachtung auf eine Retardierung der Elektronen durch das positive Oberflächenpotential in der Oxidschicht zurück. Eine grosse Menge Elektronen kann nämlich in der elektrisch schlecht leitenden Oxidschicht nur mit Schwierigkeiten nachgeführt werden. Nach dem Aufprall eines schweren Ions herrscht somit kurzzeitig ein Elektronenmangel an der Target-Oberfläche.

Wie einleitend bereits festgehalten wurde, sind die von uns verwendeten MCPs auf der Vorder- und Rückseite mit einer Nickel-Chrom-Legierung sorgfältig beschichtet worden. Die Eindringtiefe der Metallschicht in die Kanäle ist lediglich von der Grössenordnung eines halben Kanaldurchmessers. Da aber ein grosser Anteil aller produzierter Sekundärelektronen aus dieser Nickel-Chrom-Schicht zwischen den MCP-Kanaleingängen erzeugt wird, sollten die von uns verwendeten MCPs eher das Verhalten von Metallflächen zeigen (Ein Umpolen der Repeller-Gitterspannung reduziert die Detektorzählrate um mehr als 30% [*Eberhardt*, 1984]).

*Parilis E. S., Kishinevskii L. M.:*

*Parilis und Kishinevskii* [1960] haben ein Modell zur kinetischen Sekundärelektronenemission entwickelt, das aus der Sicht der Theorie zwar umstritten ist [*Hasselkamp*, 1985], aber den experimentellen Verlauf der Sekundärelektronenausbeute in Abhängigkeit der Projektilgeschwindigkeit gut wiedergibt. Die beiden Autoren lehnten sich in ihrer Theorie an ein von *Firsov* [1959] entwickeltes Modell. *Firsov* untersuchte Stösse zwischen freien Ionen und Atomen im keV-Energiebereich. *Parilis und Kishinevskii* übernehmen diese Theorie, wenden

sie aber auf Festkörper an. Wenn das Verhältnis aus der Ordnungszahl des Projektils und des Target maximal 4 beträgt, und die Projektilenergie einige keV nicht überschreitet, dann kann die Sekundärelektronenausbeute  $\gamma$  wie folgt approximiert werden [Parilis und Kishinevskii, 1960]: Nahe der Schwellengeschwindigkeit  $v_0$ , die typischerweise zwischen  $6\text{-}7 \cdot 10^6 \text{ cm s}^{-1}$  variiert, steigt  $\gamma$  langsam mit einem Polynom vierten Grades in der Geschwindigkeit  $v$  an. Im Geschwindigkeitsbereich  $v = 1\text{-}3 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$  ist  $\gamma$  proportional zu  $v^2 - (3/2 v_0)^2$ . Höhere Geschwindigkeiten werden durch den folgenden Ausdruck genähert:

$$\gamma = v \cdot \arctan[0.6 \cdot 10^{-7}(v - v_0)] \quad (10)$$

Gleichung (10) geht für hohe Geschwindigkeiten  $v$  in eine Gerade über, die die Geschwindigkeitsachse bei  $1.05 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$  schneidet. Thum [1979] ersetzte die Gleichung (10) durch den allgemeineren Ausdruck  $a \cdot v \cdot \arctan[b \cdot (v-c)]$ . Er stellte fest, dass diese Gleichung seine Sekundärelektronenausbeuten, die er aus kontaminierten Targetflächen gewonnen hatte, über den gesamten Geschwindigkeitsbereich zwischen  $0.6\text{-}2 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$  gut nähert. Allerdings muss er sich mit etwas tieferen Schwellengeschwindigkeiten behelfen ( $\leq 5 \cdot 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ ).

*Hasselkamp:*

*Hasselkamp* [1985] erbrachte eindeutig den Nachweis, dass die mittlere Anzahl Sekundärelektronen  $\gamma_{\text{H}_2}$  beim Beschuss einer Metalloberfläche mit molekularem Wasserstoff nicht additiv aus den entsprechenden  $\gamma_{\text{H}}$  des atomaren Wasserstoffes errechnet werden darf. Allerdings untersuchte Hasselkamp Projektil bei einer ca. 10 mal grösseren Geschwindigkeit ( $v \approx 1 \cdot 10^8 \text{ cm s}^{-1}$ ) als wir in dieser Arbeit verwenden.

## 2.5.2 Messungen an Microchannel Plates

Der Einfluss der Projektilparameter auf den Verstärkungsfaktor der Microchannel Plates kann nur mit einem Experiment befriedigend geklärt werden.

Die Messungen wurden in der CASYMS-Eichkammer (vormals: GEOS-Eichkammer) durchgeführt. Die Anlage wurde von *Ghielmetti et al.* [1983] und *Bratschi* [1988] eingehend beschrieben. In der CASYMS-Eichkammer können Instrumente simultan über eine Fläche von ca  $20 \times 20 \text{ cm}^2$  mit einem massenaufgelösten Ionenstrahl ausgeleuchtet werden. Die Massenseparation erfolgt in einem gekrümmten Wienfilter. In der Ebene senkrecht zur Ionenstrahlrichtung befindet sich ein bewegbarer Faradayauffänger mit eingebautem Channel Electron Multiplier (CEM) mit der Typenbezeichnung PHILIPS B312A. Der Faraday-Auffänger erlaubt zusammen mit dem eingebauten CEM eine ortsabhängige Bestimmung der Ionendichten. Dank der drehbaren Experimentierplattform können mehrere Detektoren nacheinander bei annähernd gleichen Bedingungen geeicht werden.

Die aktive Detektionsfläche des Faradayauffängers beträgt  $5 \text{ cm}^2$ , diejenige des CEMs  $0.1 \text{ cm}^2$ . Die Ladung, die der Faraday auffängt, wird über einen hochohmigen Widerstand ( $0.91 \cdot 10^{12} \Omega$ ) mit einem parallel geschalteten Verstärker abgeleitet. Aus dem Spannungsabfall über dem hochohmigen Widerstand kann dann der effektive Faradaystrom gemessen werden. Mit einer Präzisions-Eichquelle KEITHLEY 263 (Offset  $< 10 \text{ fA}$ ) wurde der Widerstand vorgängig



inklusive Verstärker bei Zimmertemperatur und Umgebungsdruck bestimmt (Stand: 14. Juli 1989). Die CEM-Frontseite lag auf einem Potential von -2.8 kV. Der Felddurchgriff des CEMs in den Faraday-Auffänger erzeugt einen Fokussierungseffekt und täuscht dadurch eine scheinbare höhere Teilchendichte vor. Dieser Effekt wirkt sich vor allem bei tieferen Strahlenergien aus. Die gemessenen CEM-Zählraten wurden deshalb mit dem Faktor [Schulte, 1988]

$$C(E) = \frac{1}{0.0377 \cdot E^{-1.087} + 1} \quad (11)$$

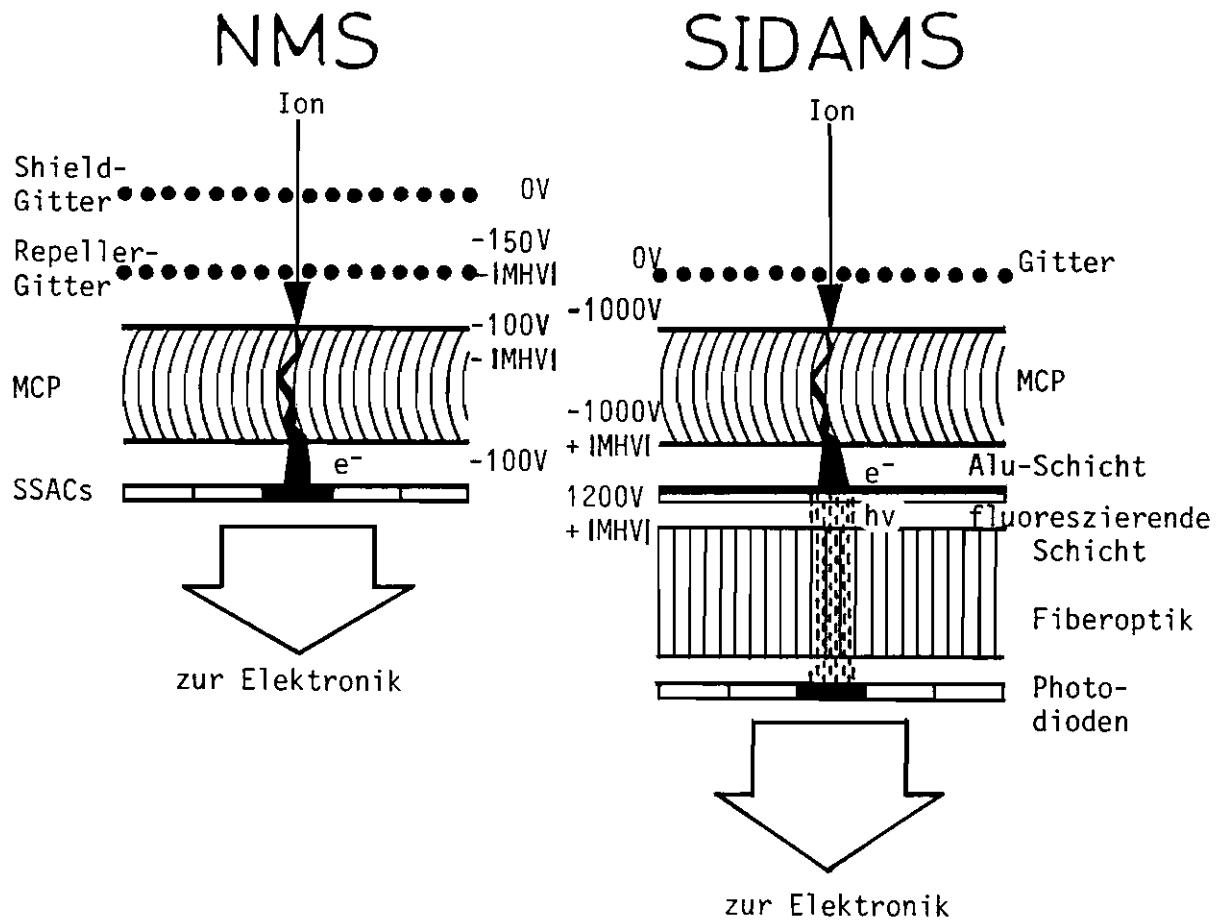
korrigiert. Für  $E$  muss die Strahlenergie in Einheiten von [keV] eingesetzt werden. Die effektive Zählrate erhält man, indem man die gemessene Zählrate mit dem Faktor  $C(E)$  multipliziert.

Das Ausmessen des Strahlprofils erfolgte in zwei Etappen: Mit dem Faraday-Auffänger der CASYMS-Kammer wurde in der Strahlmitte der absolute Ionenfluss bestimmt. Mit dem CEM wurde anschliessend in einer Ebene senkrecht zur Strahlachse in horizontaler und vertikaler Richtung ein Strahlprofil aufgenommen und ein ortsabhängiger Ionenfluss aus dem Referenzpunkt in der Strahlmitte errechnet. Die Strahlmitte befand sich in der Mitte der Detektorhorizontale zwischen MCP Nr. 2 und 3.

Zum Zeitpunkt der Messungen war das NMS-Instrument (FSr) bereits auf dem Flug, so dass eine direkte Kalibrierung des Flugdetektors nicht möglich war. Es wurden deshalb die MCPs Nr. 2 und 3 des NMS-Labordetektors verwendet (M-Labordetektor). Dieser ist bezüglich Aufbau identisch mit dem Flugdetektor (Figur 11).

Vor den gekrümmten MCPs mit Kanaldurchmessern von 25  $\mu\text{m}$  befindet sich das *Repeller-Gitter*, das gegenüber der MCP-Vorderseite um ca. -50 V vorgespannt wird. Es hindert nach vorne beschleunigte Elektronen daran, die Detektoroberfläche zu verlassen. Dem Repeller-Gitter vorgelagert ist das *Shield-Gitter*. Es sorgt für eine klare Feldbegrenzung gegen aussen und ist geerdet (sämtliche Spannungsangaben beziehen sich auf die Laborsituation). Die Transparenz der Gitter beträgt bei senkrechtem Strahleintritt 90% [Dolder, 1986]. Die MCP-Rückseite lag auf -100 V. Hinter jedem MCP sammelte eine in 64 Segmente unterteilte SSACs-Plate die Elektronen, welche die MCP-Kanäle verlassen. Anstelle des Bordcomputers las ein 6502-Mikroprozessor (AIM 65) alle  $\sim 63$  s die Ladung aus. Ein Spektrum umfasste 256 Auslesungen.

Um eine Idee zu erhalten, wie gross der Unterschied zwischen verschiedenen Detektorsystemen sein kann, wurde zusätzlich noch der SIDAMS Testdetektor D3D mitgeeicht. Dieser Detektor und seine Eigenschaften sind bei Moor [1989] beschrieben. Im SIDAMS-Detektor finden ebenfalls MCPs (Hersteller: *Galileo Optics*) mit gekrümmten Kanälen bei einem Kanaldurchmesser von 25  $\mu\text{m}$  Anwendung. In der SIDAMS-Anordnung befindet sich aber vor dem MCP nur *ein* Gitter in der Funktion eines *Shield-Gitters*. MCP-rückseitige werden die Elektronen beim SIDAMS-Detektor nicht durch SSACs gesammelt, sondern werden mit 2200 V nachbeschleunigt. Sie durchstossen eine dünne Aluminiumschicht und treffen anschliessend auf einen Szintillator. Dabei lösen sie Lichtblitze im sichtbaren Wellenlängenbereich aus. Eine Faserplatte leitet die optischen Signale auf einen



Figur 11: Schematischer Aufbau des NMS- und SIDAMS-Detektors.

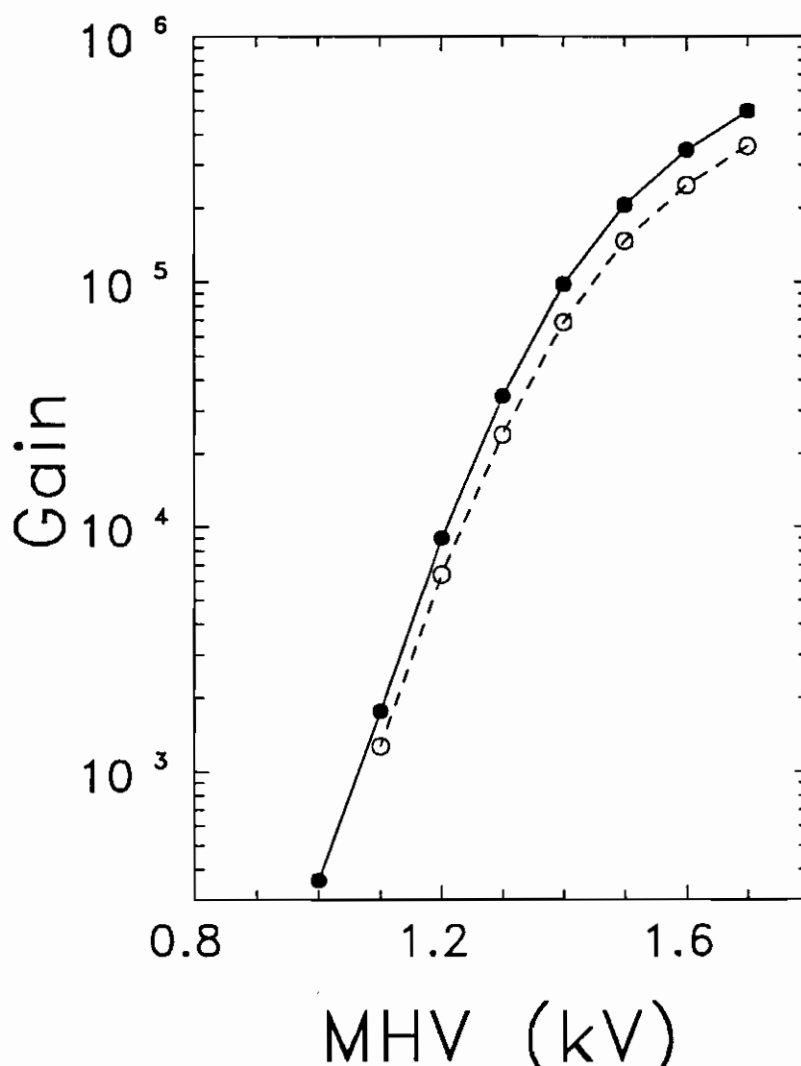
Photodioden-Array ab. Betrieben wurde der SIDAMS-Detektor im Analog-Modus.

Zur Rauschunterdrückung führte man sämtliche Hochspannungen für beide Detektoren über T-Filter. Mindestens zu Beginn und am Ende jedes Messtages, wenn nötig oder bei Unregelmäßigkeiten auch zwischen den Messerien, erfolgte eine MCP-Untergrundmessung. Zur Bestimmung des Untergrundes wurde die Ionenquelle inklusive Optik mit einem Schiebeventil von der Experimentierplattform getrennt. Die Strahlenergie wurde zwischen 250 eV bis 2.5 keV gewählt, wodurch der für das NMS interessante Energiebereich abgedeckt werden konnte. Im Falle des Referenzstrahles  $N_2^+$  ergänzen zwei Datenpunkte bei 5 keV und 10 keV die Messerie. Sie dienen dazu, mögliche Sättigungseffekte aufzudecken. Von  $Ar^+$ ,  $C_3H_7^+$  und  $C_4H_{10}^+$  sind ebenfalls Messungen bei 5 keV aufgenommen worden.  $N_2^+$ -Messungen fanden am ersten und letzten Tag des Messprogrammes statt. Dadurch war gewährleistet, dass Langzeiteffekte über die zweiwöchige Messperiode und die Reproduzierbarkeit der Resultate kontrolliert werden konnten.

Der Ionenfluss des Eichstrahles sollte  $\sim 2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  nicht überschreiten. Damit ist sichergestellt, dass die Fehler, die durch Nichtlinearitätseffekte im Detektor entstehen, kleiner als 5% sind. Während den Messungen variierte der Ionenfluss zwischen  $2 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  und  $3 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ .

Der MCP-Verstärkungsfaktor hängt vor allem von der MHV-Hochspannung ab. In einer

halblogarithmischen Darstellung mit logarithmischer Abszisse steigt der MCP-Verstärkungsfaktor des M-Analysators zunächst linear mit der MHV-Hochspannung an, flacht aber dann gegen hohe MHV-Hochspannungen langsam ab (Figur 12). Wie bereits in früheren Kapiteln erwähnt wurde, entsteht die Abflachung der Kurve dann, wenn noch innerhalb der MCP-Röhrchen raumladungskritische Elektronendichten erreicht werden. Es ist zu erwarten, dass im linearen Bereich der Gain-Kurve eine direkte Proportionalität zwischen der Zahl der Sekundärelektronen, die beim Aufprall des Ions erzeugt wurden, und dem Ausgangssignal am Ende der MCPs besteht. Im nichtlinearen Teil der Gain-Kurve reduzieren Sättigungseffekte aller Voraussicht nach die vom Projektil abhängigen Gain-Unterschiede. Als MHV-Hochspannung verwendeten wir beim NMS-Detektor 1.2 keV und 1.7 keV. Diese beiden Werte entsprechen ungefähr den Gain-Stufen hex C und hex F des Fluginstrumentes. Dabei ist die tiefere MHV-Hochspannung eine Kompromisslösung: Auf der einen Seite geht die erreichbare Strahlintensität für Spezies, die nur umständlich aus einem Gas über Dissoziation erzeugt werden können, drastisch zurück; dieser Umstand erfordert eine hohe Detektorverstärkung. Auf der anderen Seite möchte man noch im linearen Teil der Gain-Kurve bleiben, um möglichen Sättigungseffekten auszuweichen. Beim SIDAMS-Prototypen legten wir die MHV-Hochspannungen auf 1.4 keV und 1.6 keV fest.



**Figur 12:** Der Gain von  $N_2^+$ -Ionen als Funktion der MHV-Spannung bei einer Strahlenergie von 1.0 keV (fette Kreise) und 0.5 keV (offene Kreise).

Ein Messzyklus umfasste folgende Programmpunkte:

- Aufnahme des Strahlprofiles mit Hilfe des Faraday-Auffängers und des CEMs, wie oben beschrieben.
- Der NMS-Detektor und anschliessend der SIDAMS-Detektor werden in den Strahl geschwenkt.
- Bei je zwei MHV-Spannungen werden mindestens drei Spektren aufgenommen.

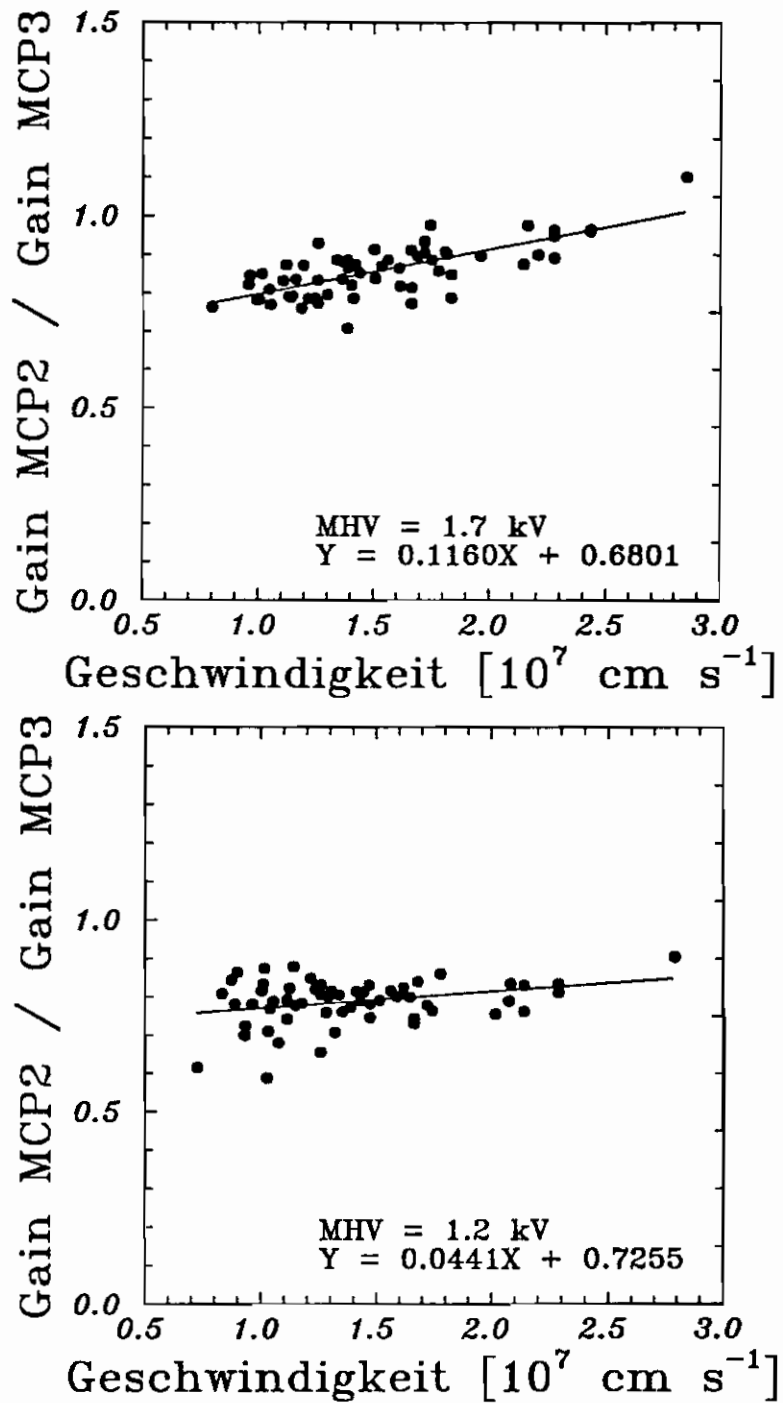
Die Liste der Ionen, die man gerne untersucht hätte, war gross. Es musste eine sinnvolle Auswahl getroffen werden. Im Massenbereich des M-Analysators interessierten alle Ionen, die auch in der Koma von P/Halley beobachtet werden konnten. Aus Kohlenwasserstoffverbindungen unterschiedlicher Grösse erhoffte man sich, eine Systematik ableiten zu können, indem man sukzessive H, C oder O-Atome abspaltete. Sollte sich herausstellen, dass sich der Yield eines Molekülions  $\gamma_m$  als Superposition der entsprechenden atomaren Yields  $\gamma_i$  auffassen lässt, dann sind auch die atomaren Yields von H, C, N, O und S von grossem Interesse. Obschon Messungen von Edelgasionen im Zusammenhang mit Kometen uninteressant sind, ermöglichen sie wertvolle Vergleiche mit der Literatur. Ebenso darf der molekulare Stickstoff ( $N_2^+$ ), das "Eichgas" des NMS, im Messprogramm nicht fehlen. Einen Überblick über die verwendeten Ionenstrahlen vermittelt die Tabelle 3.

**Tabelle 3:** Zusammenstellung der untersuchten Ionen. Auf der linken Seite ist das Muttermolekül aufgeführt, währendem auf der rechten Seite die daraus erzeugten Ionen aufgeführt sind. Die Strahlflussdichten sind von der Strahlenergie abhängig. Die angegebenen Werte sind typische Werte für Strahlenergien zwischen 1 - 2 keV.

Ausgangsgas	Ionen	Strahlfluss [ $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ]
H <sub>2</sub> (Wasserstoff)	H <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2·10 <sup>5</sup>
	H <sup>+</sup>	2·10 <sup>4</sup>
CH <sub>4</sub> (Methan)	CH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
NH <sub>3</sub> (Ammoniak)	NH <sub>3</sub> <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
	NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2·10 <sup>5</sup>
H <sub>2</sub> O (Wasser)	H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>	5·10 <sup>4</sup>
N <sub>2</sub> (Stickstoff)	N <sub>2</sub> <sup>+</sup>	2·10 <sup>5</sup>
	N <sup>+</sup>	4·10 <sup>4</sup>
CO (Kohlenmonoxid)	CO <sup>+</sup>	3·10 <sup>5</sup>
NO (Stickstoffmonoxid)	NO <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
H <sub>2</sub> S (Schwefelwasserstoff)	H <sub>2</sub> S <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
	S <sup>+</sup>	7·10 <sup>4</sup>
Ar (Argon)	Ar <sup>+</sup>	2·10 <sup>5</sup>
CO <sub>2</sub> (Kohlendioxid)	CO <sub>2</sub> <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
	O <sup>+</sup>	7·10 <sup>4</sup>
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (Butan)	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> <sup>+</sup>	7·10 <sup>4</sup>
	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup>	2·10 <sup>5</sup>
	C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	1·10 <sup>5</sup>
	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	6·10 <sup>4</sup>
Kr (Krypton)	Kr <sup>+</sup>	9·10 <sup>4</sup>
	Kr <sup>++</sup>	7·10 <sup>4</sup>

### 2.5.3 Resultate

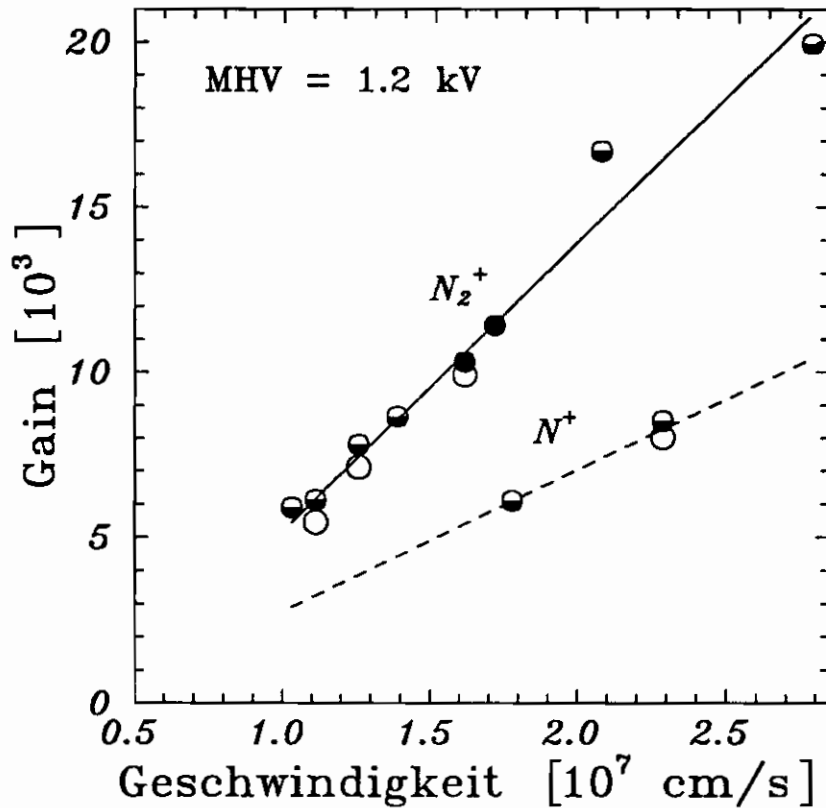
Im folgenden wird als Detektor-Gain der mittlere Verstärkungsfaktor der MCPs Nr. 2 und 3 des NMS-Laborprototypen verwendet (32 mittlere Pixel je MCP). Figur 13 vergleicht den



**Figur 13:** Verhältnis des Detektor-Gains zwischen der Microchannel Plate Nr. 2 und 3, bei einer MHV-Spannung von 1.2 kV und 1.7 kV für alle bei der Eichung verwendeten Ionensorten und Geschwindigkeiten. Eingezeichnet ist auch die Regressionsgerade durch die Datenpunkte.

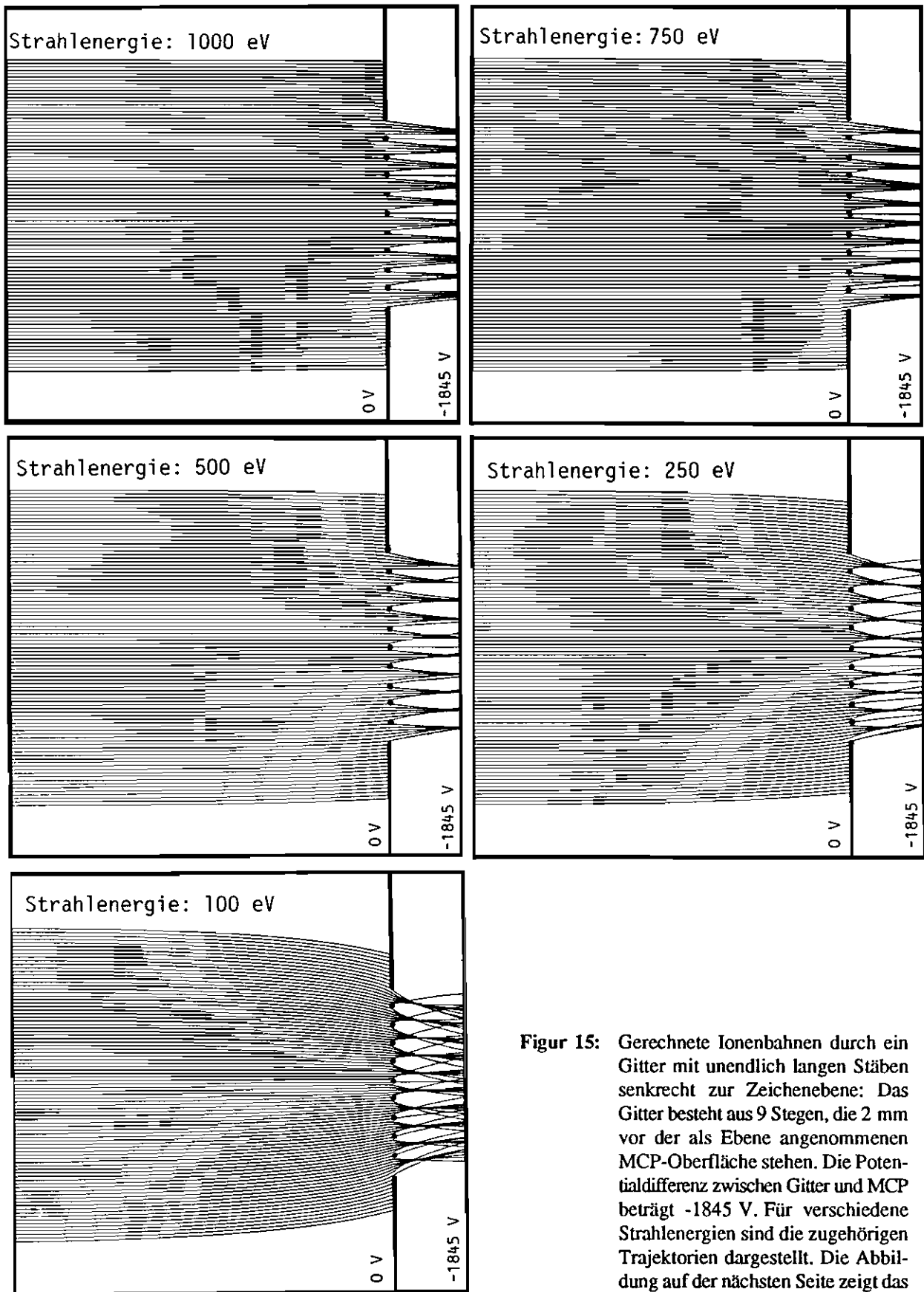
Gain dieser beiden MCPs. Die Verstärkungsfaktoren unterscheiden sich um ungefähr 20%, wobei ein leichter Gang mit der Projektilgeschwindigkeit erkennbar ist. Die Streuung der Datenpunkte um die Regressionsgerade ist ein Mass für den zufälligen Fehler. Er beträgt ~10%.

Figur 14 zeigt die Stickstoffdaten, die zu Beginn und gegen den Schluss der zweiwöchigen Messperiode aufgenommen wurden. Innerhalb der geschätzten Fehlergrenzen sind die  $N_2^+$ -Gains gut reproduzierbar.

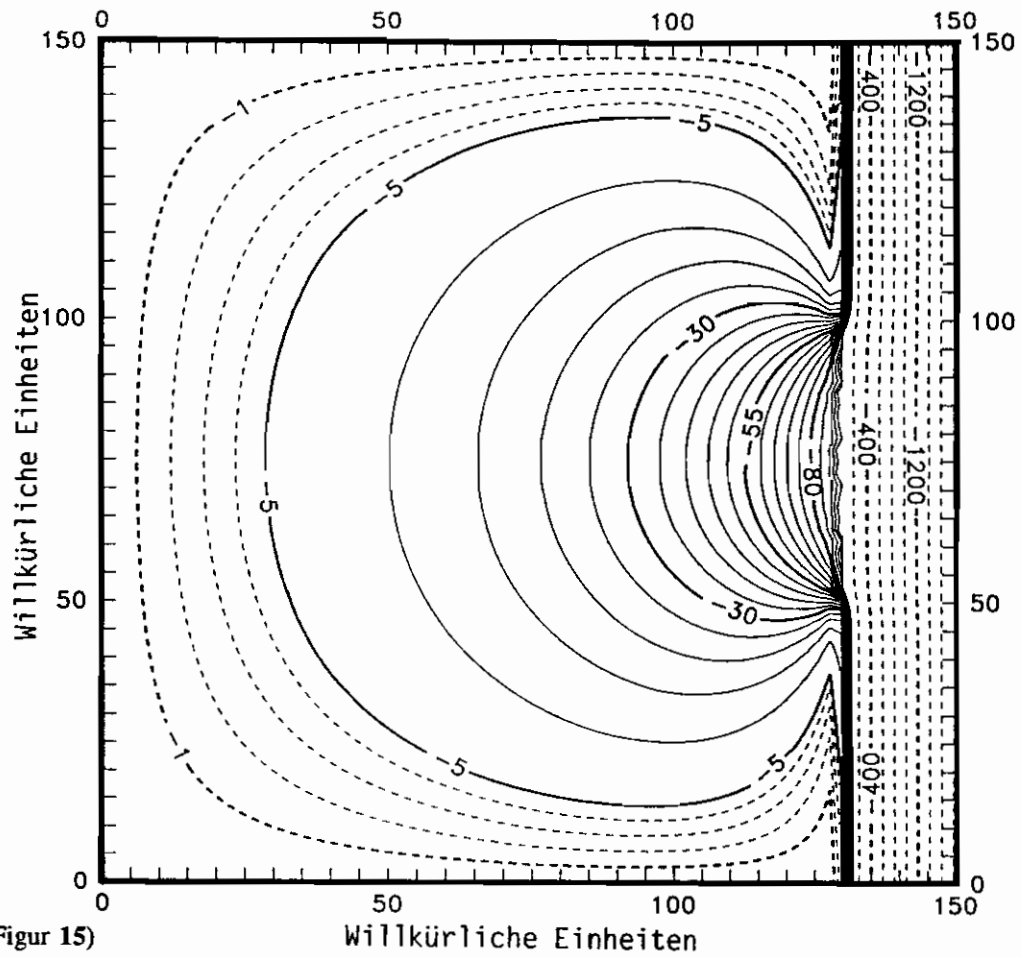


Figur 14: Der Gain von  $N_2^+$  und  $N^+$  in Abhängigkeit der Auftreffgeschwindigkeit auf den Detektor. Die fetten Kreise wurden am ersten, die halbfetten am zweiten und die offenen Kreise am zweitletzten Tag aufgezeichnet. Die eingetragenen Kurven sind Regressionsgeraden durch die jeweilige Punkteschar.

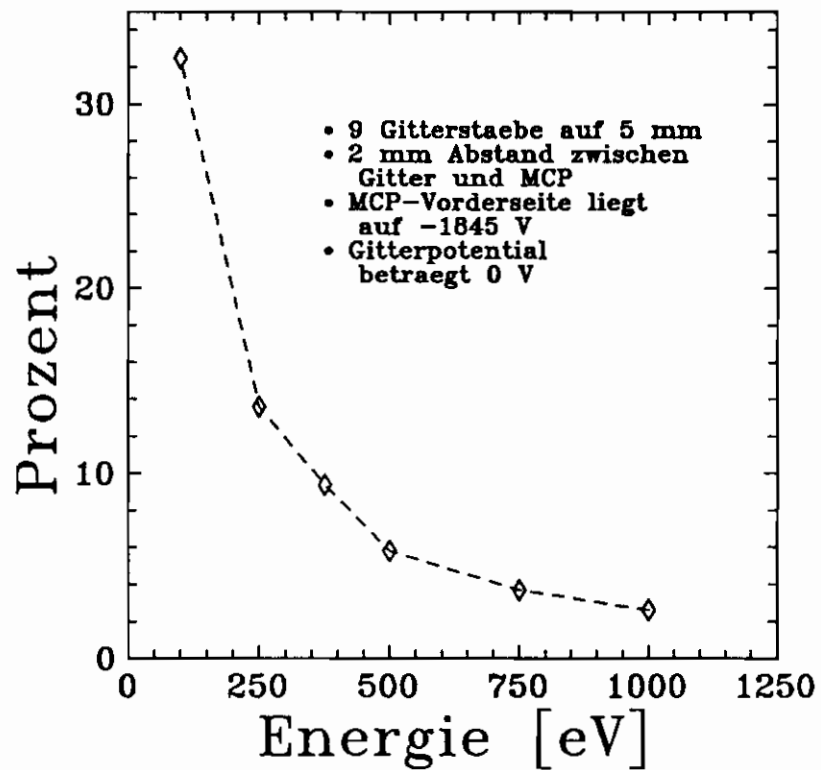
Bei tiefen Projektilgeschwindigkeiten besteht die Gefahr, dass analog zum CEM ein Felddurchgriff durch das Shield-Gitter zu einer scheinbar grösseren Detektorfläche führt, indem die Ionen durch das Feld angezogen werden. Simulationsbeispiele ergeben aber, dass sich der befürchtete Felddurchgriff erst bei Energien  $< 250$  eV bemerkbar macht (Figuren 15 und 16). In der Computerrechnung wurde anstelle des gekreuzten und  $45^\circ$  zur Detektorebene abgedrehten Kreuzgitters der ungünstigere Fall eines Gitters mit unendlich langen, vertikalen Stäben ohne Querstreben verwendet. Die gerechneten Felddurchgriffe sind aus diesem Grunde als obere Grenzen aufzufassen.



**Figur 15:** Gerechnete Ionenbahnen durch ein Gitter mit unendlich langen Stäben senkrecht zur Zeichenebene: Das Gitter besteht aus 9 Stegen, die 2 mm vor der als Ebene angenommenen MCP-Oberfläche stehen. Die Potentialdifferenz zwischen Gitter und MCP beträgt -1845 V. Für verschiedene Strahlenergien sind die zugehörigen Trajektorien dargestellt. Die Abbildung auf der nächsten Seite zeigt das Feldlinienbild.



(Fortsetzung Figur 15)



Figur 16: Die scheinbare Vergrößerung des Detektors in [%], aufgetragen gegen die Strahlenergie. Siehe auch Figur 15.

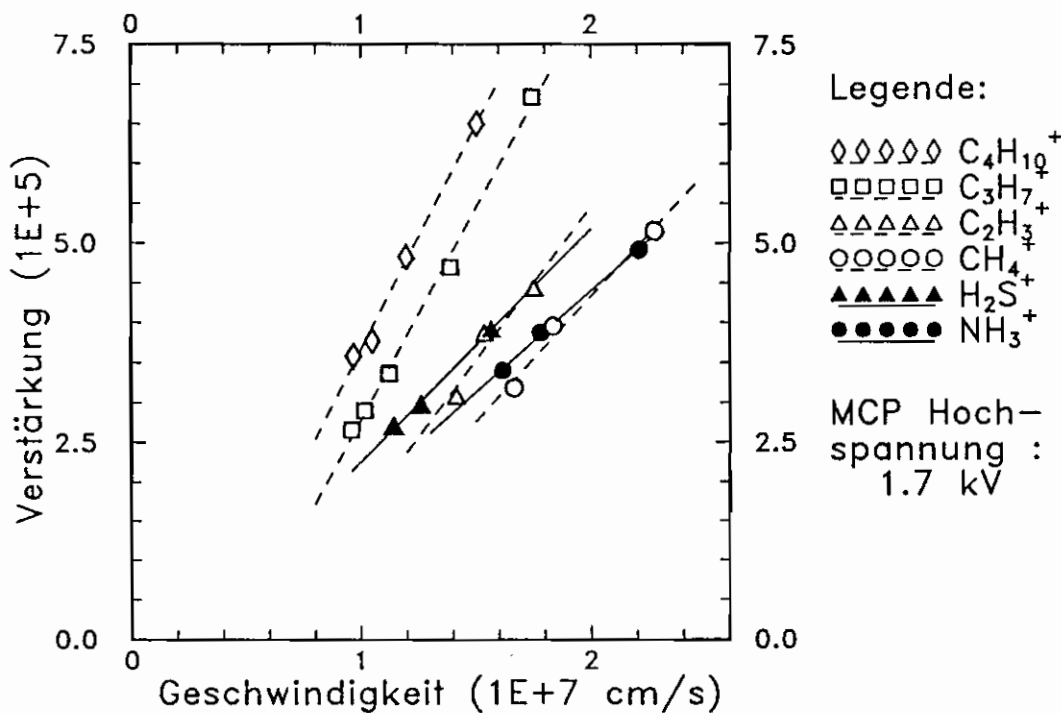


Der MCP-Gain hängt über dem untersuchten Geschwindigkeitsbereich annähernd linear von der Auftreffgeschwindigkeit der Ionen auf die MCPs ab. Allerdings biegen die Gain-Kurven in der Schwellengegend etwas ab. Vermutlich befindet man sich dort bereits in einer Geschwindigkeitszone, in der die Potentialemission zum Vorschein kommt.

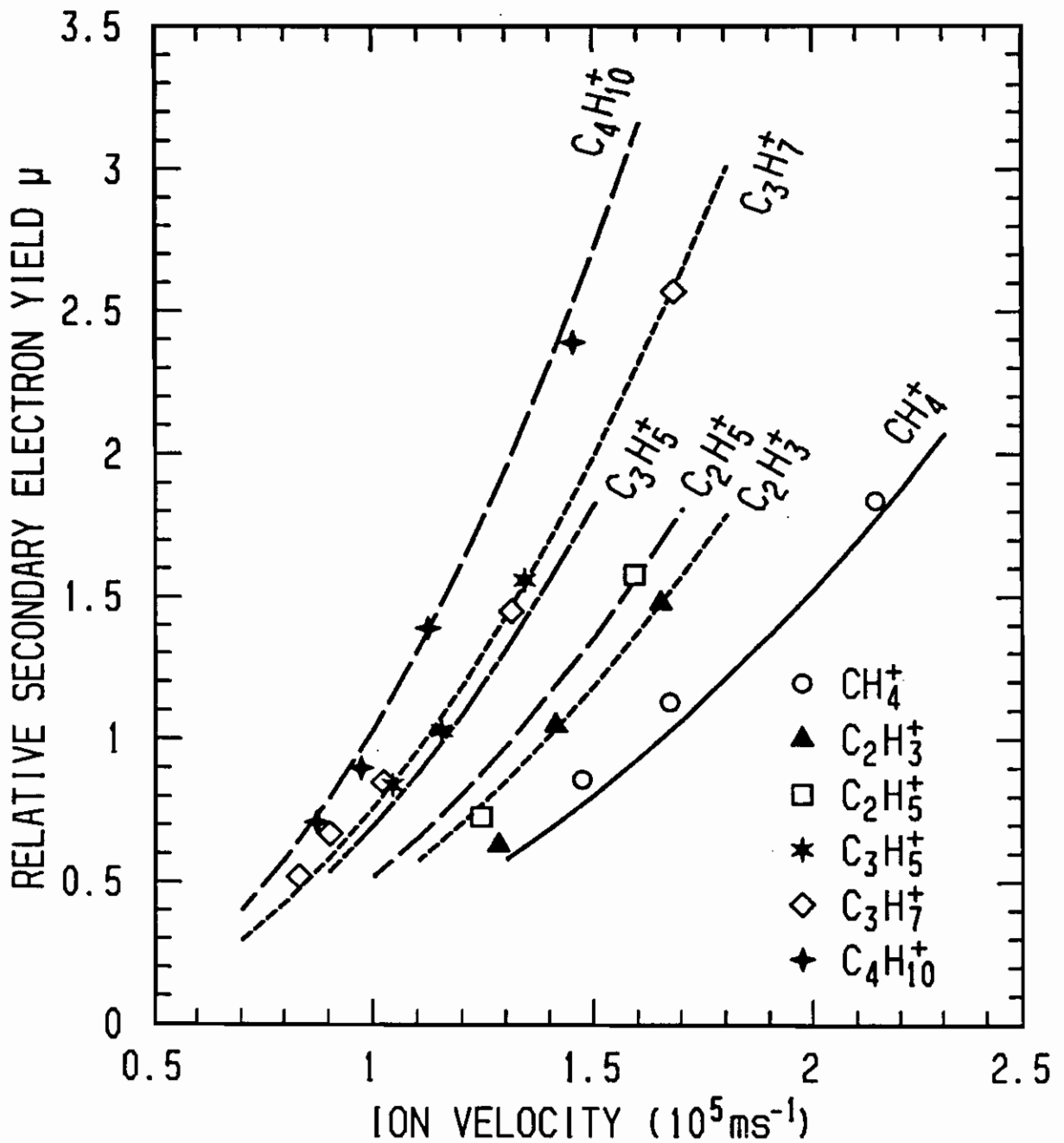
Die MCPs sind empfindlicher für schwere Ionen als für leichte, solange Ionen ähnlicher Struktur verglichen werden. Es ist naheliegend, diese Beobachtung auf die höhere kinetische Energie zurückzuführen, die das schwerere Ion auf die Detektorfläche übertragen kann. Andererseits ist nicht zu übersehen, dass der Detektorverstärkungsfaktor auch von der Struktur des Projektils abhängig ist. So reagiert der Detektor auf ein  $S^+$ -Ion vergleichbar stark wie auf ein  $CH_4^+$ -Ion, obschon Schwefel (32 u/e) wesentlich schwerer ist als Methan (16 u/e). Es lassen sich weitere ähnliche Beispiele aufzählen (siehe auch Figur 17).

Aus den Daten der Kohlenwasserstoffionen und der (Fragment-)Ionen von  $NH_3$ ,  $H_2O$  und  $H_2S$  folgt, dass die Detektorempfindlichkeit mit jedem abgespalteten H-Atom etwas zurückgeht. Ebenso lassen sich die Gain-Kurven der  $C_xH_y^+$ -Ionen deutlich in Gruppen mit gleicher Anzahl Kohlenstoffatome einteilen.  $N_2^+$ , schliesslich, registrieren die MCPs etwa doppelt so gut wie  $N^+$ . Alle diese Beobachtungen legen nahe, dass der Gain eines Molekülions zumindest näherungsweise additiv aus den Gains der im Molekül vorkommenden Atome hervorgeht. Andererseits zeigen die Messungen, dass  $H^+$  und  $H_2^+$  die Additivität eindeutig verletzen. Näheres zu diesem Thema findet man am Schluss dieses Abschnittes.

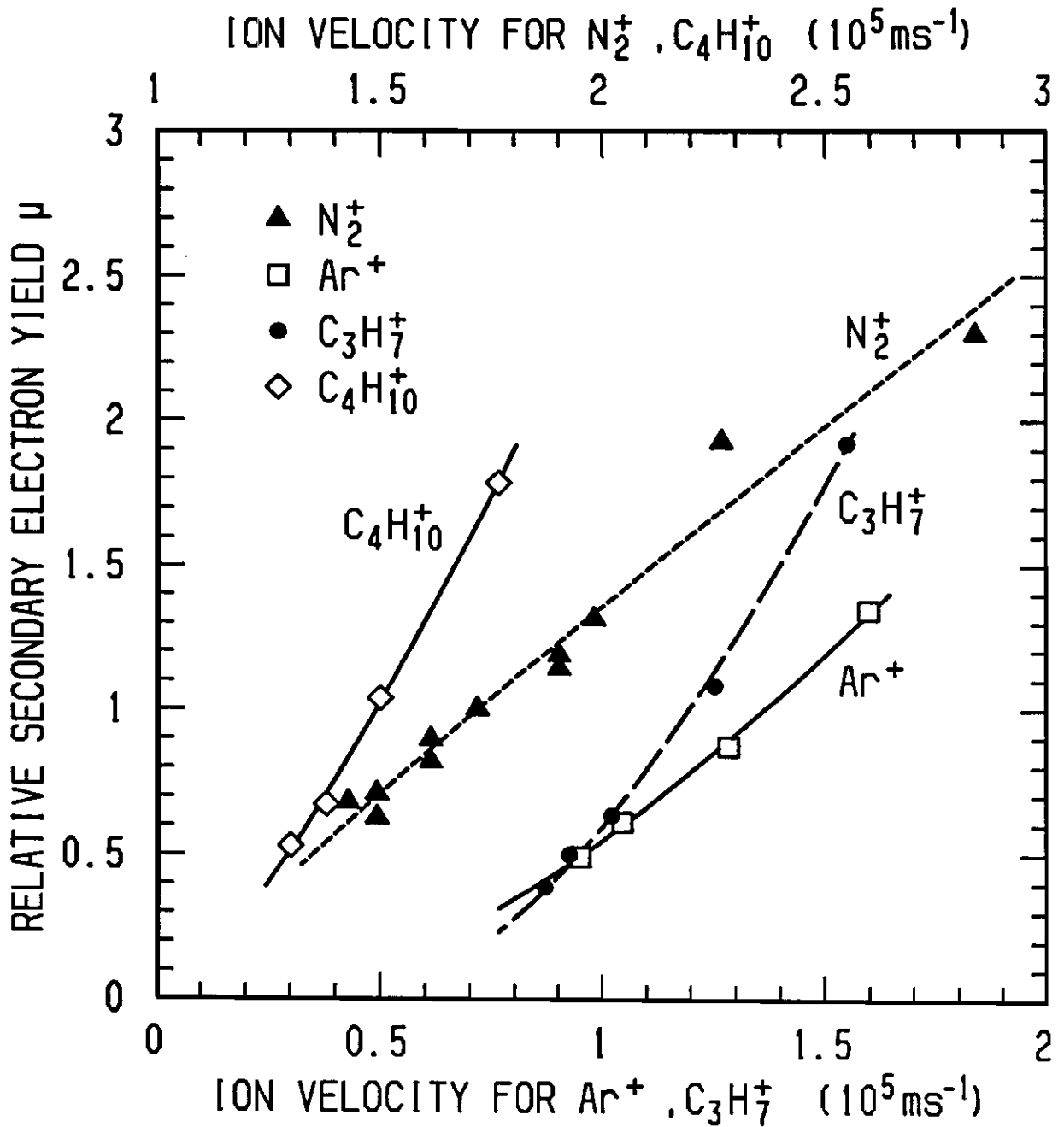
**Figur 17:** Der Gain respektive die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  des NMS-Laborprototypen, dargestellt für verschiedene Projektile und Geschwindigkeiten  $v$  (MHV-Spannungen bei 1.2 kV oder 1.7 kV). Bei einer MHV-Spannung von 1.2 kV entspricht eine relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu = 1$  einem Detektor-Verstärkungsfaktor von  $6.476 \cdot 10^3$ .



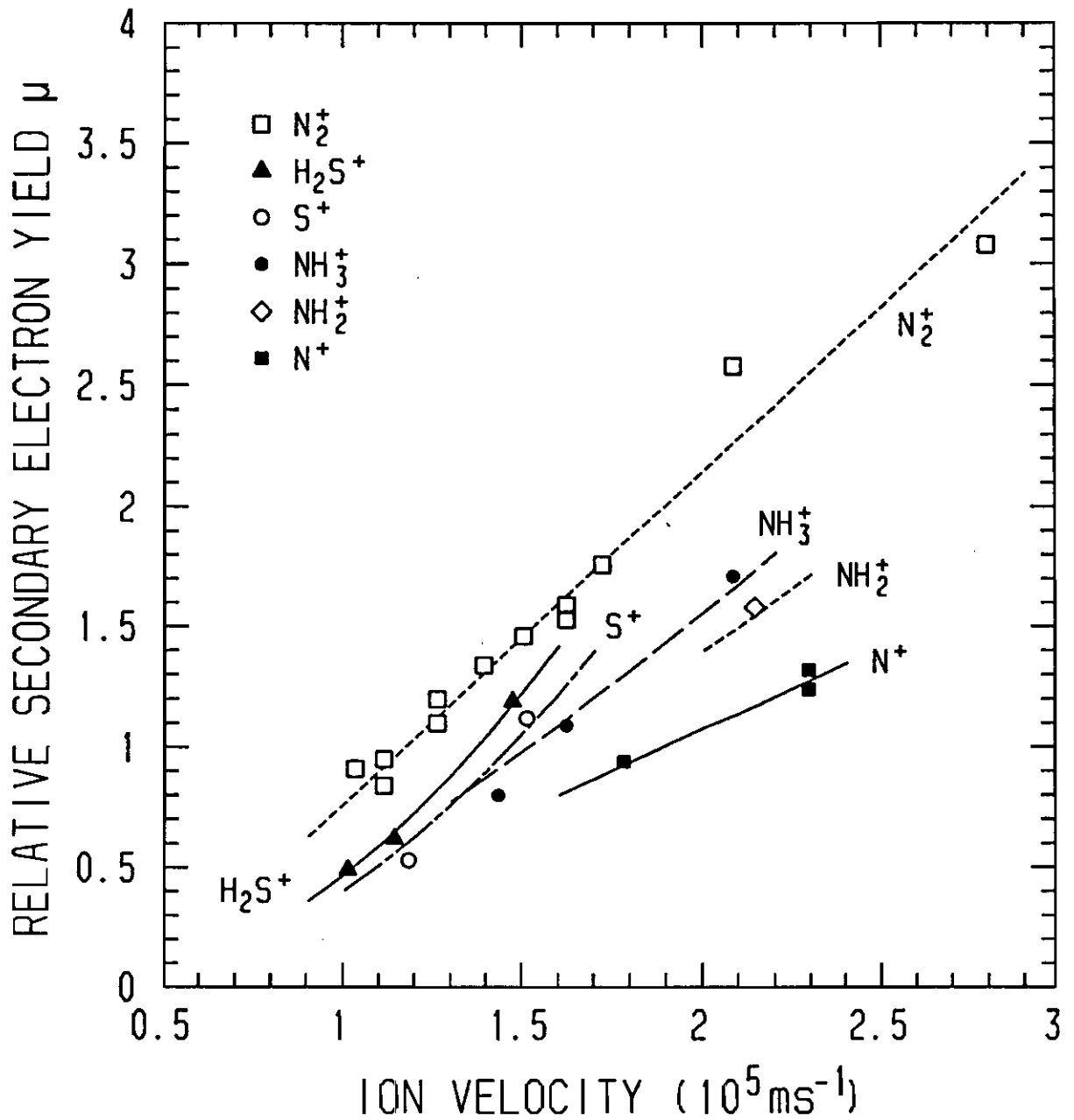
**Figur 17a.** Einige ausgewählte Beispiele bei 1.7 keV MHV-Spannung. Die Regressionsgeraden sind nur zwecks Übersicht eingetragen.



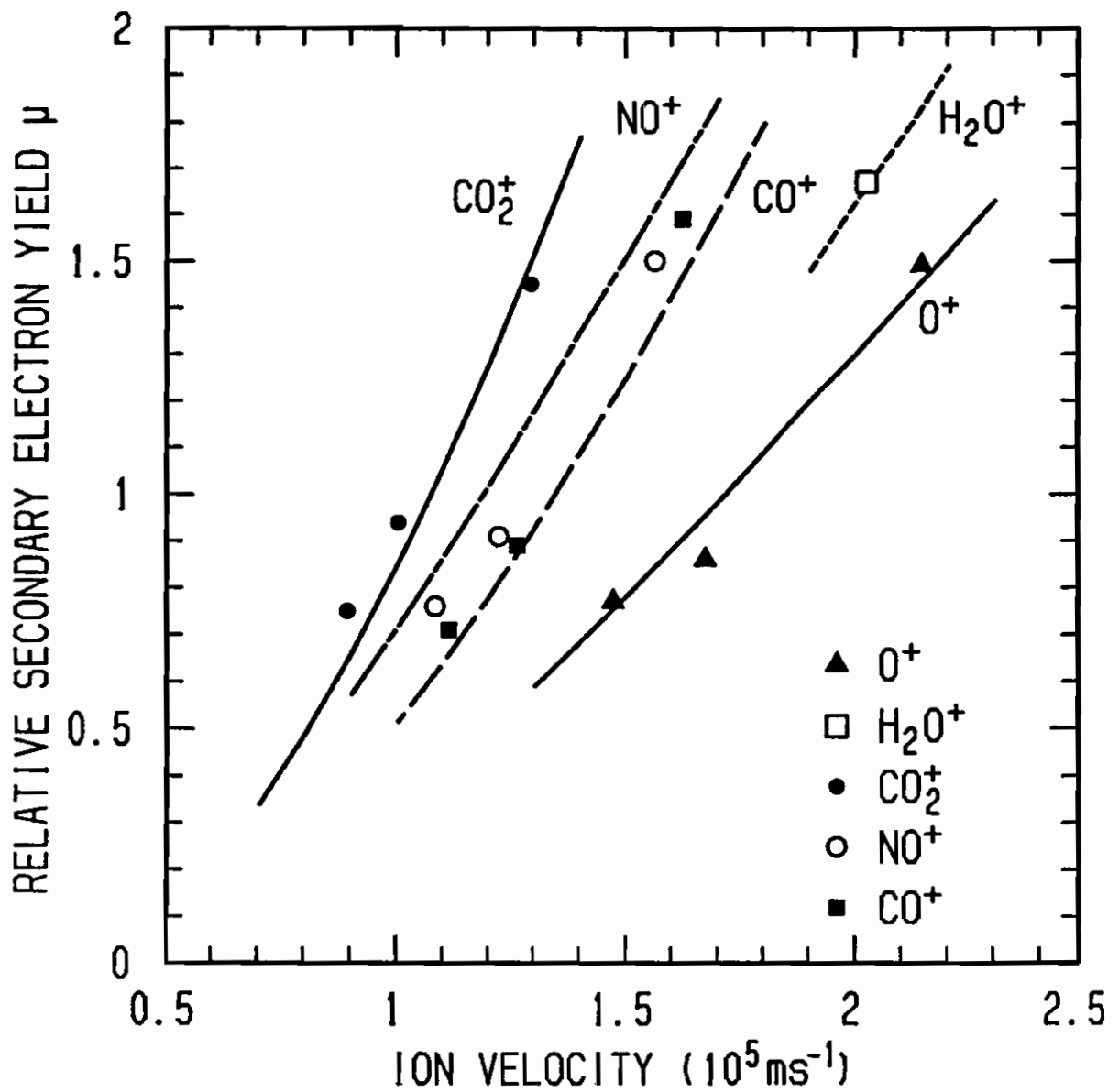
Figur 17c. Die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  von Kohlenwasserstoffionen  $\text{C}_n\text{H}_m^+$  bei 1.2 kV MHV-Spannung. Die Regressionskurven wurden nach Methode 2 bestimmt, wobei die Koeffizienten aus Tabelle 4 benutzt wurden (siehe auch nachfolgenden Text).



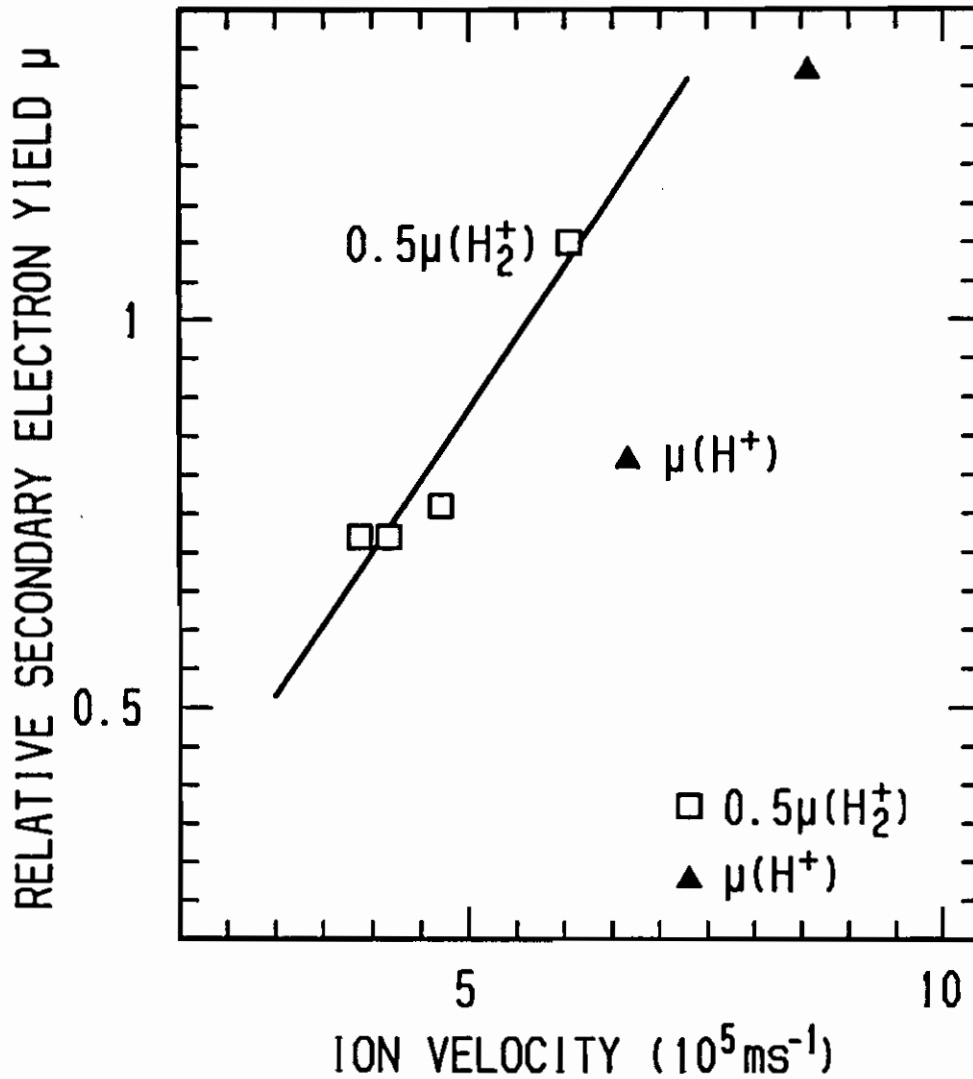
Figur 17b. Die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  in Abhängigkeit der Geschwindigkeit für  $Ar^+$ ,  $N_2^+$ ,  $C_3H_7^+$  und  $C_4H_{10}^+$  bei 1.2 keV MHV-Spannung. Zu  $C_3H_7^+$  und  $Ar^+$  gehört die untere, zu  $N_2^+$  und  $C_4H_{10}^+$  die obere Geschwindigkeitsachse. Eingetragen sind Ausgleichskurven, die pro Ionensorte den Messungen gemäss Methode 1 angepasst wurden (siehe auch nachfolgenden Text).



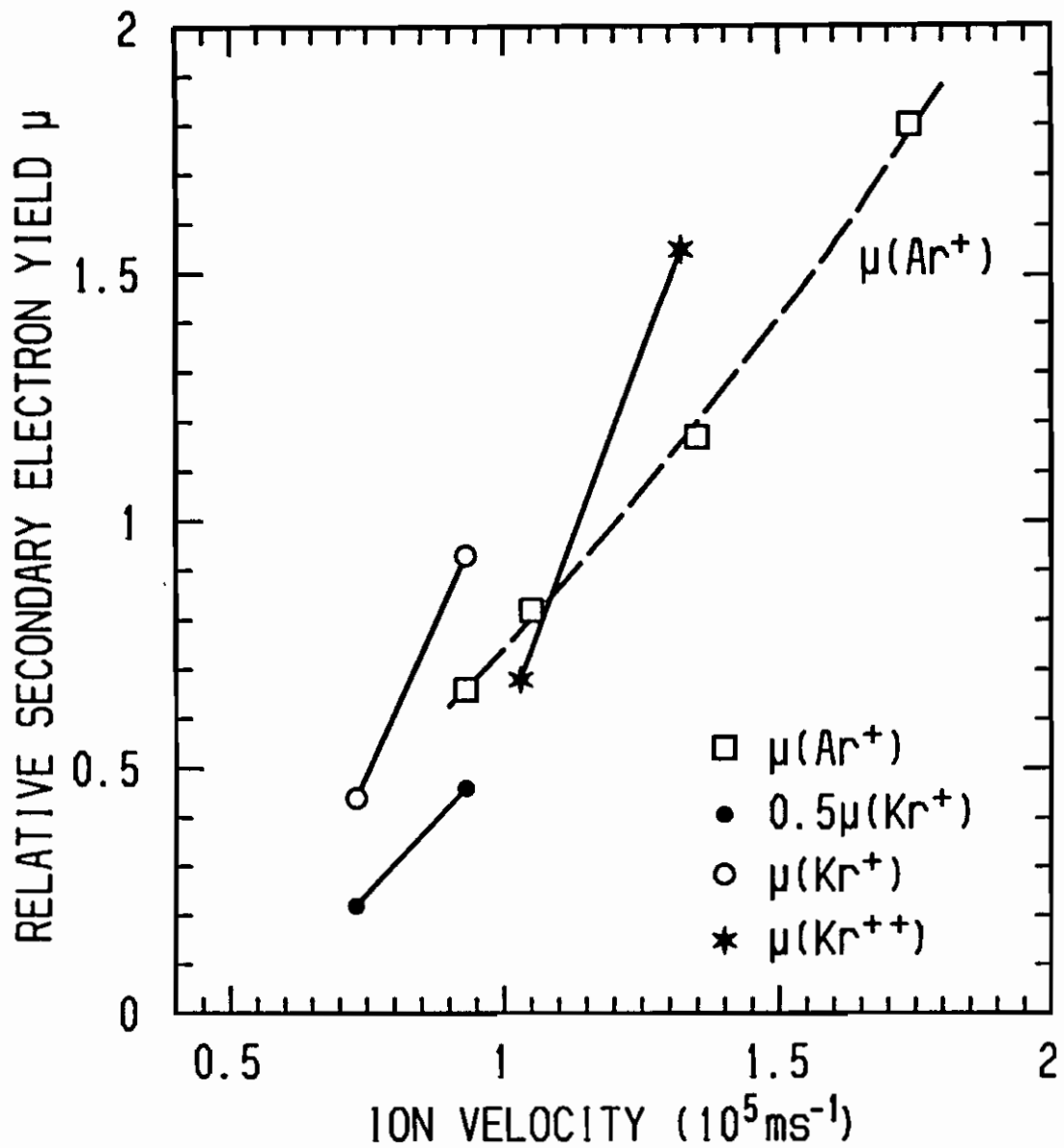
Figur 17d. Die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  von Stickstoff- und Schwefelatome enthaltenden Ionen bei 1.2 kV MHV-Spannung. Durch die Messdaten wurden Regressionskurven nach Methode 2 gelegt, wobei die Koeffizienten in Tabelle 4 benutzt wurden (siehe auch nachfolgenden Text).



Figur 17e. Die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  von sauerstoffhaltigen Ionen bei 1.2 kV MHV-Spannungen. Die Ausgleichskurven wurden nach Methode 2 unter Verwendung der Koeffizienten aus Tabelle 4 berechnet (siehe auch nachfolgenden Text).



Figur 17f. Die gemessene relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  von  $H^+$  im Vergleich mit der aus den  $H_2^+$ -Ionen gerechneten Sekundärelektronenproduktion unter Annahme eines linearen Additionsgesetzes  $\mu(H^+,v) = 0.5 \cdot \mu(H_2^+,v)$ . Die eingezeichnete Kurve ist die nach Methode 1 ermittelte Regressionskurve durch die  $0.5 \cdot \mu(H_2^+,v)$ -Punkte (siehe auch nachfolgenden Text). Die MHV-Spannung betrug 1.2 kV.



Figur 17g. Die relative Sekundärelektronenproduktion  $\mu$  von Edelgasen bei 1.2 kV MHV-Spannungen. Entsprechende Kryptonaten sind untereinander verbunden. Durch die Argonpunkte wurde eine Regressionskurve nach Methode 1 gelegt.

Erwartungsgemäss sind die Unterschiede im Gain zwischen verschiedenen Ionensorten bei 1.7 kV MCP-Spannung kleiner als bei 1.2 kV. Bei 1.7 kV erreicht die Elektronenlawine noch innerhalb des MCP-Kanals eine raumladungskritische Grösse. Die Anzahl ausgelöster Sekundärelektronen am Auftreffort des Projektils spielt daher nicht mehr eine so wichtige Rolle wie im ungesättigten Fall.

Wir versuchten, unsere Gain-Messungen mit einem empirischen Modell zu erfassen. Ein solches Modell eröffnet die Möglichkeit, den Verstärkungsfaktor von nicht untersuchten Molekülen zu bestimmen. Zudem können nur spärlich bekannte Gain-Kurven ergänzt werden. Für die Auswertung der Daten wurden schliesslich, in Anlehnung an die in 2.5.1 zitierte Literatur, drei verschiedene Methoden benutzt:

#### *Methode 1:*

Getrennt nach Ionensorten und MHV-Spannungen wurde die Funktion  $A \cdot v \cdot \arctan[B \cdot (v-C)]$  durch jede Messerie gelegt, die mindestens 3 Gain-Werte bei verschiedenen Projektilgeschwindigkeiten  $v$  umfasste. Die Konstanten  $A$ ,  $B$  und  $C$  wurden für jedes Datenset nach der Methode des kleinsten Chiquadrates ermittelt.

Diese Methode liefert Gain-Kurven als Funktion der Projektilgeschwindigkeit, die die Messungen am besten wiedergeben. Die Methode ist empfindlich auf Ausreisser und Messfehler. Sie erlaubt keine Voraussagen für nicht gemessene Spezies und benötigt mindestens 3 Datenpunkte pro Ionensorte.

#### *Methode 2 & 3:*

Methode 2 und 3 setzen ein "Additionsmodell" voraus. Wir nehmen wiederum an, dass sich die Elementionen wie in Methode 1 durch die Funktion  $A \cdot v \cdot \arctan[B \cdot (v-C)]$  beschreiben lassen. In Methode 2 sind die Parameter  $A$  und  $B$  vom Element abhängig, währenddessen  $C$  eine universelle Schwellengeschwindigkeit ist. Im Modell 3 wird die Schwellengeschwindigkeit vom Element abhängig gewählt. Der Gain eines Molekülions geht aus der Summe der Gains der Elemente gewichtet mit ihrem Vorkommen im Molekül hervor.

Methode 2 und 3 bieten den Vorteil, dass innerhalb gewisser Grenzen auch Gain-Kurven, welche nicht gemessen wurden, vorausgesagt werden können. Ausserdem sind die beiden Methoden sehr stabil gegenüber Ausreissern. Vor allem die Gain-Messungen bei 1.7 kV MCP-Spannung zeigen aber deutlich, dass die Additivität nur *näherungsweise* erfüllt ist. Sie hat vorzugsweise dort Gültigkeit, wo Moleküle mit verwandter chemischer Struktur verglichen werden.

Mit Hilfe der nichtlinearen Ausgleichmethode nach *Levenberg-Marquardt* [Press et al., 1986] erfolgte die Bestimmung der Parameter  $A$ ,  $B$  und  $C$  aus sämtlichen Labordaten, ausgenommen die Messungen mit  $H^+$ ,  $H_2^+$ ,  $Ar^+$ ,  $Kr^+$  und  $Kr^{++}$ . Die Resultate der Methoden 2 und 3 sind in Tabelle 4 aufgeführt. Auswertung 2 ergibt eine Schwellengeschwindigkeit  $v_o = 0.3 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$  bei 1.2 kV MCP-Spannung und  $v_o = -0.2 \cdot 10^7 \text{ cm s}^{-1}$  bei 1.7 kV MCP-Spannung. Damit bestätigt sich die auch am SIDAMS-Detektor beobachtete Regel, dass die extrapolierte Schwellengeschwindigkeit mit steigender Detektorsättigung absinkt. Bei 1.2 kV MCP-Spannung liegen die Schwellengeschwindigkeiten im Bereich der Werte, wie sie in der Literatur über stossinduzierte Sekundärelektronenemission an Metalloberflächen zu finden



sind.

Die Methode 3 ergibt, obschon mehr freie Parameter zur Verfügung stehen, nur unwesentlich bessere Ausgleichskurven durch die Messdaten als die Methode 2. Die mit Methode 3 erhaltenen Atom-spezifischen Schwellengeschwindigkeiten sind ausserdem nur als Rechengrössen ohne physikalische Bedeutung aufzufassen.

**Tabelle 4:** Parameter  $A$ ,  $B$  und  $C$  der Gain-Kurve  $A \cdot v \cdot \arctan[B \cdot (v-C)]$  als Funktion der Projektilgeschwindigkeit  $v$ , gerechnet mit der nichtlinearen Ausgleichsmethode nach Levenberg-Marquardt [Press *et al.*, 1986]. Durch Addition der Verstärkungsfaktoren der atomaren Ionen erhält man den Verstärkungsfaktor des entsprechenden Molekülions. Die obere Hälfte der Tabelle zeigt die Resultate nach Methode 2, die untere Hälfte die Resultate nach Methode 3 (siehe auch Text).

Ion:	MCP-Spannung = 1.2 kV			MCP-Spannung = 1.7 kV		
	A[10 <sup>-2</sup> cm <sup>-1</sup> s]:	B[10 <sup>-7</sup> cm <sup>-1</sup> s]:	C[10 <sup>7</sup> cm s <sup>-1</sup> ]:	A[10 <sup>-2</sup> cm <sup>-1</sup> s]:	B[10 <sup>-7</sup> cm <sup>-1</sup> s]:	C[10 <sup>7</sup> cm s <sup>-1</sup> ]:
<u>Methode 2:</u>						
H	5.61	0.0560	0.334	1.86	0.0602	-0.221
C	12.6	0.139	0.334	3.81	0.121	-0.221
N	2.75	1.879	0.334	0.873	→ ∞	-0.221
O	4.75	0.738	0.334	1.70	0.779	-0.221
S	35.4	0.111	0.334	1.38	28.2	-0.221
<u>Methode 3:</u>						
H	14.9	0.0352	0.933	1.59	0.111	0.617
C	25.5	0.0481	-0.282	2.59	0.106	-1.72
N	2.65	2.51	0.493	0.878	→ ∞	→ -∞
O	27.9	0.0757	-0.0124	4.25	0.178	-0.561
S	56.3	0.0741	0.364	3.02	0.270	-1.85

#### 2.5.4 Auswirkungen auf das NMS

Aus den vorangehenden Kapiteln entnehmen wir, dass bei MCPs, welche analog betrieben werden, die Nachweisempfindlichkeit von der Struktur und der Geschwindigkeit des Projektils abhängt. Näherungsweise gilt für Moleküle eine Art Additions-gesetz. Es stehen drei Auswertemethoden zur Verfügung, von denen sich zwei auch zur Bestimmung von Gain-Kurven eignen, die nicht direkt im Labor gemessen wurden.

In Tabelle 5 ist die *relative* Nachweisempfindlichkeit  $Y(X^+, E, MHV)$  ("Yield") von Ionen  $X^+$  verschiedener Atome, Moleküle und Radikale aufgeführt. Als Energie  $E$  verwenden wir  $\sim 25$  eV pro Nukleon plus Nachbeschleunigung im Instrument. Die relative Nachweisempfindlichkeit  $Y(X^+, E, MHV)$  ist normiert auf einen  $N_2^+$ -Ionenstrahl bei Nominalenergie (700 eV). Die relative Nachweisempfindlichkeit wurde je nach Güte des Verfahrens nach Methode 1 oder 2 bestimmt. Für das Referenzion  $N_2^+$  betrug bei einer MHV-Spannung von 1.2 kV die Geschwindigkeit  $v_{N_2^+} = 1.17366 \cdot 10^7$  cm s<sup>-1</sup> und der Gain  $G_{N_2^+} = 6.476 \cdot 10^3$ . Bei einer MHV-Spannung von 1.7 kV lauten die entsprechenden Grössen  $v_{N_2^+} = 1.31227 \cdot 10^7$  cm s<sup>-1</sup> und  $G_{N_2^+} = 3.6796 \cdot 10^5$ . Für einfach geladene Ionen wurde die Auftreffgeschwindigkeit auf die Microchannel Plates mit der Formel

$$v[10^7 \text{ cm s}^{-1}] = \sqrt{24.87 + \frac{MHV[V] + 102.5}{M[u]}} \cdot 13891 \cdot 10^2 \quad (12)$$

berechnet. Hierbei ist  $M$  die Nukleonenzahl und  $MHV$  die MCP-Spannung. 24.87 eV ist die kinetische Energie pro Nukleon während des Giotto-Vorbeifluges am Kometen P/Halley und -102.5 V das Potential, auf dem die MCP-Rückseite liegt. Die Nachbeschleunigung im M-Analysator bewirkt einen ausgleichenden Effekt, so dass die Unterschiede in der Projektil-abhängigen Nachweisempfindlichkeit bescheiden ausfallen.

**Tabelle 5:** Die relative Detektorempfindlichkeit des NMS M-Analysators für diverse Ionen bei Nominalenergien und bei zwei verschiedenen MHV-Spannungen. Alle Yields sind auf  $N_2^+$  normiert.

Masse [u/e]:	Ion:	Relativer Yield bei $MHV = 1.2 \text{ kV}$ :	Relativer Yield bei $MHV = 1.7 \text{ kV}$ :
1	$H^+$	?	?
2	$H_2^+$	1.7 (?)	1.4 (?)
12	$C^+$	0.63 (?)	0.60 (?)
13	$CH^+$	0.68	0.68
14	$CH_2^+$	0.71	0.76
	$N^+$	0.74	0.69
15	$CH_3^+$	0.75	0.82
	$NH^+$	0.77	0.76
16	$CH_4^+$	0.78	0.88
	$NH_2^+$	0.81	0.84
	$O^+$	0.69	0.80
17	$CH_5^+$	0.81	0.93
	$NH_3^+$	0.84	0.91
	$OH^+$	0.73	0.86
18	$NH_4^+$	0.88	0.98
	$H_2O^+$	0.77	0.92
19	$H_3O^+$	0.80	0.97
20	$Ne^+$	?	0.88 (?)
24	$C_2^+$	0.65 (?)	0.61 (?)
25	$C_2H^+$	0.67 (?)	0.65 (?)
26	$C_2H_2^+$	0.69	0.69
	$CN^+$	0.80	0.78
27	$C_2H_3^+$	0.71	0.73
	$CHN^+, HNC^+$	0.83	0.83
28	$C_2H_4^+$	0.73	0.77
	$HCNH^+, H_2NC^+$	0.86	0.88
	$CO^+$	0.76	0.81
	$N_2^+$	1.00	1.00
29	$C_2H_5^+$	0.74	0.80
	$HCO^+, HOC^+$	0.79	0.85
	$N_2H^+$	1.03	1.05
30	$C_2H_6^+$	0.75	0.83
	$H_2CO^+$	0.81	0.89
	$N_2H_2^+$	1.05	1.10
	$NO^+$	0.82	0.96

(Fortsetzung auf  
der nächsten  
Seite)

(Fortsetzung Tabelle 5)

Masse [u/e]:	Ion:	Relativer Yield bei <i>MHV</i> = 1.2 kV:	Relativer Yield bei <i>MHV</i> = 1.7 kV:
30	CH <sub>4</sub> N <sup>+</sup>	0.91	0.97
31	H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup>	0.84	0.93
	N <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup>	1.08	1.14
	HNO <sup>+</sup>	0.85	1.00
32	CH <sub>3</sub> OH <sup>+</sup>	0.86	0.97
	N <sub>2</sub> H <sub>4</sub> <sup>+</sup>	1.10 (?)	1.18 (?)
	H <sub>2</sub> NO <sup>+</sup>	0.87	1.05
	O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.87	1.00
	S <sup>+</sup>	0.53	0.73
33	CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.88	1.00
	O <sub>2</sub> H <sup>+</sup>	0.89	1.04
	HS <sup>+</sup>	0.56	0.78
34	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	0.91	1.08
	H <sub>2</sub> S <sup>+</sup>	0.58	0.81
35	H <sub>3</sub> S <sup>+</sup>	0.61	0.87
36	C <sub>3</sub> <sup>+</sup>	0.70	0.72
37	C <sub>3</sub> H <sup>+</sup>	0.72	0.76

Unter Annahme einer typischen Ionenzusammensetzung auf jeder Masse wurde für die Verstärkungsstufen hex C (*MHV* ≈ 1.2 kV) und hex F (*MHV* ≈ 1.7 kV) für jede Masse des M-Analysators eine relative Detektorempfindlichkeit eingeführt (Tabelle 6). Bei der Verstärkungsstufe hex C wird ausserdem berücksichtigt, dass durch die GS/HG-Verhältnisse bereits der mittlere Unterschied in der Detektorempfindlichkeit korrigiert wurde (siehe Kapitel 2.4).

**Tabelle 6:** Relative, von der Ionensorte abhängige Detektorempfindlichkeit des NMS M-Analysators für die Verstärkungsstufen hex C und hex F. Auf jeder Masse  $M$  wurde eine typische Ionenzusammensetzung angenommen. In den relativen Empfindlichkeiten der Verstärkungsstufe hex C wird berücksichtigt, dass ein Teil der Korrektur bereits durch die GS/HG-Korrektur erfolgte (Werte in Klammern sind unkorrigiert).

Masse [u/e]:	$MHV = 1.2 \text{ kV}$		$MHV = 1.7 \text{ kV}$	
	Angenommene Ionenzusammen- setzung:	Relative Detektor- empfindlichkeit:	Angenommene Ionenzusammen- setzung:	Relative Detektor- empfindlichkeit:
12	100% $C^+$	(0.63) 0.69	100% $C^+$	0.60
13	100% $CH^+$	(0.68) 0.75	100% $CH^+$	0.68
14	100% $CH_2^+$	(0.71) 0.78	100% $CH_2^+$	0.76
15	100% $CH_3^+$	(0.75) 0.82	100% $CH_3^+$	0.82
16	50% $O^+$ , 50% $NH_2^+$	(0.75) 0.82	100% $O^+$	0.80
17	50% $OH^+$ , 50% $NH_3^+$	(0.79) 0.87	100% $OH^+$	0.86
18	70% $H_2O^+$ , 30% $NH_4^+$	(0.80) 0.88	100% $H_2O^+$	0.92
19	100% $H_3O^+$	(0.80) 0.88	100% $H_3O^+$	0.97
24	100% $C_2^+$	(0.65) 0.71	100% $C_2^+$	0.61
25	100% $C_2H^+$	(0.67) 0.73	100% $C_2H^+$	0.65
26	50% $CN^+$ , 50% $C_2H_2^+$	(0.75) 0.82	100% $C_2H_2^+$	0.69
27	75% $HCN^+$ , 25% $C_2H_3^+$	(0.80) 0.88	50% $HCN^+$ , 50% $C_2H_3^+$	0.78
28	100% $HCNH^+$	(0.86) 0.94	100% $CO^+$	0.81
29	75% $HCO^+$ , 25% $C_2H_5^+$	(0.78) 0.85	75% $HCO^+$ , 25% $C_2H_5^+$	0.84
30	50% $H_2CO^+$ , 50% $C_2H_6^+$	(0.78) 0.85	75% $H_2CO^+$ , 25% $C_2H_6^+$	0.88
31	100% $H_3CO^+$	(0.84) 0.92	100% $H_3CO^+$	0.93
32	100% $S^+$	(0.53) 0.58	100% $CH_3OH^+$	0.97
33	100% $CH_3OH_2^+$	(0.88) 0.96	100% $HS^+$	0.78
34	100% $H_2S^+$	(0.58) 0.64	100% $H_2S^+$	0.81
35	100% $H_3S^+$	(0.61) 0.67	100% $H_3S^+$	0.87
36	100% $C_3^+$	(0.70) 0.77	100% $C_3^+$	0.76
Mittelwert mit Standardabweichung des Einzelwertes:		(0.73 ± 0.10)		0.80 ± 0.11

### 3. Komamodell mit detaillierter Chemie

#### 3.1 Einleitung

Seit jeher haben Kometen als aussergewöhnliche Himmelserscheinungen Aufsehen erregt. Nachweislich haben bereits die ersten Hochkulturen Kometen beobachtet und als besondere Himmelserscheinungen dokumentiert [Bailey et al., 1990]. Kometen wurden oftmals als Vorboten von Unheil wie Krieg, Naturkatastrophen, Pest und Tod interpretiert. Das Wort "Komet" stammt aus dem griechischen κομήτης, der Langhaarige. Erst mit der Begründung der klassischen Mechanik durch Newton (1642-1727) wurden die mythologischen Kometentheorien durch naturwissenschaftliche Ansätze verdrängt. Edmond Halley stellte fest, dass gewisse Kometen sich auf langgestreckten Ellipsen bewegen und deshalb periodisch sein müssen. Für einen der wohl heute wie damals auffälligsten Kometen gelang es Halley, den Zeitpunkt der Rückkehr in das innere Sonnensystem richtig vorauszusagen. Er unterstrich damit auf eindruckliche Art und Weise die Gültigkeit der Newton'schen Mechanik. Der Komet erhielt später Halleys Name und sollte als P/Halley noch ein zweites Mal wissenschaftlich Geschichte schreiben.

Es blieb jedoch der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts vorenthalten, tiefer in die Physik der Kometen vorzudringen. 1950 stellte Whipple seine wegweisende Theorie des "schmutzigen Schneeballes" auf [Whipple, 1950]. Danach ist ein Komet ein Festkörper, d.h. ein lose gebundenes Konglomerat aus gefrorenem Eis und steinähnlichem Material. Das feste Material besteht aus Silikatkörnern unterschiedlichster Grösse und organisches Material enthaltendem Staub. Whipples ursprüngliche Vermutung, dass es sich beim Eis - neben kleineren Mengen an H-, C-, N- und O-haltigen Verbindungen (wie CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, etc.) - vor allem um Wassereis handelt, sollte sich in der Folge bestätigen.

Unter der Wirkung der Sonneneinstrahlung sublimieren die gefrorenen Gase vom Kometenkern weg und hüllen den Kern in eine dichte Gaswolke, die Koma, ein. Die Sublimation erfolgt entweder direkt ab der Kometenoberfläche, oder aber es bildet sich vorerst ein Gasreservoir unter einer nur stellenweise durchlässigen Staubschicht, aus der das Gas durch Poren und Löcher ins Freie tritt. Das wegströmende Gas reisst die leichteren Staubteilchen mit. Diese bilden, indem sie das Sonnenlicht reflektieren, den für uns sichtbaren, gekrümmten und wenig strukturierten Staubschweif, der sich bis auf 10<sup>6</sup> km ausdehnen kann.

Durch die UV-Strahlung der Sonne werden die Gase auch ionisiert, womit ein Teil der Gase in den vierten Aggregatzustand gehoben wird. Die ionisierten Gase sind als Plasmaschweif sichtbar. Der bei vielen Kometen als fein strukturierter, separater Schweif erkennbare Plasma- oder Ionenschweif führte Biermann [1951] als Beweis an, dass von der Sonne ein geladener Teilchenstrom, der sog. Sonnenwind, ausgehen muss. Er stellte nämlich fest, dass der Ionenschweif immer von der Sonne weggerichtet ist. Auch heute gelten Kometen in der

Plasmaphysik als sehr interessante aber auch komplizierte Objekte. So sind sie beispielsweise ideale Objekte, an denen Schockphänomene zwischen Stossfronten zweier Plasmen untersucht werden können.

Unser Wissen über Kometenkernsteckt auch heute noch in den Anfängen. Zuverlässige experimentelle Daten gibt es eigentlich nur für den Kometen P/Halley. Die Modellierung des Kometenkernes ist nach wie vor mit vielen Unbekannten verbunden. So beeinflusst beispielsweise die uns nicht zugängliche, innere Struktur die Wärmebilanz des Kometenkerns. Die Beobachtungen zeigen, dass die Kometenoberfläche sehr stark strukturiert ist. Ausserdem strömen die Gase offenbar bevorzugt aus relativ gut zu lokalisierenden Stellen von der Oberfläche weg.

Auf die Schwierigkeiten bei der Modellierung der Staub- und Gaskoma wird in den folgenden Kapiteln eingegangen.

In immer rascherer Abfolge wurden in den letzten Jahrzehnten die Kometenmodelle verbessert und ausgeweitet. Parallel dazu verhalfen immer genauere Fernerkundungsmethoden zu immer detaillierteren Informationen über Kometen. Dennoch blieben bis vor kurzem einige zentrale Fragen offen, wie z.B.: Wie sieht ein Kometenkern aus? Welche physikalischen und chemischen Prozesse spielen sich in der innersten Zone der Koma ab? Sobald nämlich die Kometen für optische Instrumente sichtbar werden, verdeckt die gleichzeitig sich entwickelnde Gas- und Staubkoma die Sicht auf den Kometenkern. Die meisten optischen Methoden können zudem nur Kolonnendichten messen, womit die räumliche Auflösung auf zwei Dimensionen beschränkt bleibt. Erst die weltweiten Beobachtungen des Halley'schen Kometen unter Einbezug erstmaliger Messungen vor Ort erweiterten unser Wissen über Kometen schlagartig. Am 13. März 1986 erreichte die internationale Halley-Kampagne mit dem Vorbeiflug der europäischen Sonde Giotto am Kometen P/Halley ihren Höhepunkt. Die Giotto-Mission lieferte wertvolle Daten, die sowohl hinsichtlich Vollständigkeit wie auch hinsichtlich Qualität neue Massstäbe setzten. Die vorläufigen Resultate der Giotto-Sonde bestätigten viele Modellvoraussagen, brachten aber auch neue Erkenntnisse.

Die wenigsten Modelle in der Literatur versuchen alle Phänomene eines Kometen zu umschreiben. Die meisten Modelle beschränken sich auf gewisse Aspekte eines Kometen. So unterscheidet man zwischen Kernmodellen, Staubmodellen, Modellen zur Plasmaphysik und Komamodelle physikalischer oder chemischer Ausrichtung. Das Modell, das in den folgenden Kapiteln erörtert wird, gehört zur Klasse der Komamodelle mit Schwergewicht in der Chemie. Es war die Absicht, mit möglichst geringem Aufwand ein möglichst realitätsnahes Modell zu entwickeln, mit welchem die NMS-Flugdaten gedeutet werden können. Es wurde auf ein Modell hingearbeitet, in dem auch gemessene Parameter einbezogen werden können. Vom theoretischen Standpunkt aus gesehen ist dieses Vorgehen mit dem Nachteil verbunden, dass die Geschlossenheit des Modelles verloren geht.

## 3.2 Ein einfaches Komamodell

### 3.2.1 Übersicht

Das Komamodell in dieser Arbeit dient primär dazu, die mit dem NMS gemessenen Neutral- und Ionenspektren des Kometen P/Halley zu interpretieren. So wie hier dargestellt, beschreibt das Modell die Koma nur richtig zwischen einem radialen Abstand zum Kometenkern von  $R \approx 100$  km und der Kontaktfläche bei  $\sim 4500$  km. Es besteht jedoch die Möglichkeit, das Modell auch auf einen grösseren Distanzbereich auszubauen. Die Kontaktfläche ist diejenige Fläche, die die *magnetfeldfreie Zone* (Kavität) um den Kern gegen das Magnetfeld der Sonne abschliesst. Gleichsam einer bewegten Flüssigkeit, die an einer Kugel vorbeiströmt, umschliessen die solaren magnetischen Feldlinien die Kavität, in deren Zentrum sich der Kometenkern befindet. Innerhalb der Kavität gehen Gase, Ionen und Staub, welche von der Kernoberfläche abströmen, keine Wechselwirkungen mit Sonnenwindionen ein. Daher erübrigt sich vom Kometenkern bis zur Kontaktfläche eine aufwendige, magneto-hydrodynamische Rechnung, wie sie bereits verschiedene Autoren für Komamodelle durchgeführt haben [Mendis *et al.*, 1985; Schmidt *et al.*, 1988; Cravens, 1989].

Wir setzen in unserem Modell Kugelsymmetrie voraus, d.h. allgemeiner formuliert, dass  $\varphi$  und  $\theta$  separierbar sind. Die Halley Multicolour Camera (HMC) an Bord der Giotto-Raumsonde sandte zwar Bilder zur Erde, die eine bezüglich Aktivität differenzierte Kometenoberfläche zeigen. Im vorliegenden Modell gehen wir aber dennoch davon aus, dass die Koma bereits in 100 km Distanz zum Kometenkern stark homogenisiert ist. Verschiedene Autoren haben sich mit der Wirkung von anisotropen Gasquellen auf der Kometenoberfläche und der daraus resultierenden Dichteverteilung in der Koma beschäftigt [z.B. Kitamura, 1987; Kömle und Ip, 1987]. Kömle und Ip beispielsweise verwenden in ihren numerischen Simulationen von Jets eine starke Gasquelle im subsolaren Punkt auf dem Kometenkern. Ihre Gasquelle weist einen halben Öffnungswinkel von  $5^\circ$  auf und besitzt eine gegenüber der Sonne zugewandten, inaktiven Oberfläche 100-fach erhöhte Gasproduktionsrate. Kömle und Ip zeigen, dass sich die Konturen des ursprünglichen Gasstrahles in 100 km Distanz zur Kernoberfläche bereits stark verwischt haben. Allerdings stellen sie noch in 100 km Distanz zum Kometenkern einen maximalen Dichteunterschied von einem Faktor 7 fest. Die NMS-Flugdaten des Hauptgases  $\text{H}_2\text{O}$  geben keinerlei Hinweise auf Jets. Für einige weitere Gase kann gleiches gesagt werden. Demgegenüber haben A'Hearn *et al.* [1986] eindeutig Spurengasjets von CN und  $\text{C}_2$  im Kometen P/Halley nachgewiesen.

Die Giotto-Raumsonde befand sich zur Zeit der dichtesten Annäherung an den Kometenkern in der sonnenzugewandten Hemisphäre.  $\sim 29$  s [McDonnell *et al.*, 1987] zuvor überflog die Raumsonde Giotto den Terminator, das ist die Grenzlinie zwischen beleuchteter und im Schatten liegender Kometenoberfläche. Wir vernachlässigen für alle folgenden Betrachtungen, dass die unbeleuchtete Kometenseite unter Umständen nur reduziert ausgast. Aufgrund der neutralen Wasserdichte ist diese Vereinfachung zulässig. Millis und Schleicher [1986] beobachteten an  $\text{C}_2$ -Banden Helligkeitsvariationen mit einer Periode von 7.3 Tagen, die als Folge der Kernrotation entstehen. Möglicherweise ist dieser Bewegung eine zweite periodische Bewegung mit einer Periode von 2.2 Tagen überlagert [Keller, 1990]. In jedem Falle sind die Rotationsperioden wesentlich grösser als die ca. 1.5 h Transportzeit der Gase durch die ersten

4500 km bis zur Kontaktfläche.

Die Modellrandbedingungen werden in 100 km Entfernung zum Kometennukleus festgelegt. Die Ionen haben typische Reaktionszeiten von einigen 100 s. Innerhalb dieser kurzen Zeit kann die Ionenpopulation neu aufgebaut und den neuen Bedingungen angepasst werden. Es ist daher unproblematisch, sämtliche Ionendichten bei  $R = 100$  km auf Null zu setzen. Die dort geschätzten Neutraldichten werden ebenfalls festgelegt. Obschon keine Modellrandbedingung, darf dennoch davon ausgegangen werden, dass sich das Mischungsverhältnis der verschiedenen Gase relativ zum Referenzgas  $H_2O$  während der Flugzeit über die ersten 100 km nicht wesentlich verändert hat. Daraus folgt, dass die bei 100 km festgelegten Molekülhäufigkeiten in guter Näherung der Muttermolekülzusammensetzung entsprechen. Die Gase, welche entweder indirekt durch eine Staubschicht an die Kometenoberfläche gelangen oder direkt an der Oberfläche aus dem Eis wegsublimieren, strömen mit ca. 1/4 Schallgeschwindigkeit ins Vakuum ab. Im Gegensatz zu Planeten reicht die Masse des Kometenkerns nicht aus, das wegströmende Gas und die leichten, mitgerissenen Staubpartikel gravitationell zurückzuhalten. Die Koma befindet sich daher nicht in einem chemischen Gleichgewichtszustand, wie man dies bei Atmosphären von Planeten gewohnt ist. Stattdessen "altert" die Koma mit zunehmender kometozentrischer Distanz. Im Modell verfolgt man ein Phasenraumelement, das sich mit der expandierenden Koma mitbewegt. In einem bezüglich Geschwindigkeiten einphasigen Modell wie das vorliegende rechnet man mit einer Expansionsgeschwindigkeit, die für alle Gase und Ionen gleich gross ist. Mit einigen Einschränkungen ist diese Vereinfachung bis zur Kontaktfläche zulässig (siehe auch Kapitel 3.2.3). Während der steten Expansion wird das betrachtete Phasenraumelement vergrößert, womit die Teilchendichte im verfolgten Volumen abnimmt. Die solare UV-Strahlung ionisiert und dissoziiert die Moleküle. Dabei entstehen Ionen, Elektronen und hochreaktive Radikale. Ebenso bilden sich neue, bislang nicht vorhandene Moleküle, welche wiederum über weitere chemische Reaktionen verändert und umgebaut werden. Die Molekülzusammensetzung, welche bei 100 km festgelegt wird, variiert man nun so lange, bis die Modellrechnung die mit dem NMS gemessenen Ionen- und Neutralhäufigkeiten wiedergibt.

Die chemischen Reaktionen, die sich während der Expansion im Phasenraumelement abspielen, werden numerisch bestimmt: Ausgegangen wird von Partialteilchendichten  $n_A(R)$  in einem radialen Abstand  $R$  zum Nukleus.  $A$  steht für eine bestimmte Sorte von neutralen oder ionisierten Molekülen (resp. Elementen), beziehungsweise für Elektronen oder einen beliebigen Stosspartner. Während der Zeit  $\Delta T = \Delta R/v(R)$  lässt man nun die chemischen Reaktionen ablaufen, wobei man als Eingangsgrößen die Gas- und Ionendichten benutzt, die man im Abstand  $R$  zum Kern vorfindet. Für jede Spezies  $A$  wird der totale Teilchenzuwachs  $\Delta A_{\text{produziert}}$  und der totale Teilchenverlust  $\Delta A_{\text{zerstört}}$  aus sämtlichen chemischen Reaktionen über die Zeitspanne  $\Delta T$  ermittelt. Berücksichtigt man ausserdem die Volumenvergrößerung durch die Expansionsbewegung in der Zeit  $\Delta T$ , so lautet die neue Partialteilchendichte  $n_A(R+\Delta R)$  des Volumenelementes im Abstand  $R+\Delta R$ :

$$n_A(R+\Delta R) = \left\{ n_A(R) + \Delta A_{\text{produziert}} - \Delta A_{\text{zerstört}} \right\} \cdot \frac{v(R) \cdot R^2}{v(R+\Delta R) \cdot (R+\Delta R)^2} \quad (13)$$

Das oben beschriebene Vorgehen wird iterativ wiederholt. Auf die chemischen Reaktionen im einzelnen und deren Reaktionskonstanten  $k$  wird in Kapitel 3.3 eingegangen.



Physikalische Parameter, wie die Expansionsgeschwindigkeit  $v(R)$ , Gastemperaturen, die UV-Intensität, die Elektronentemperatur etc., werden so weit möglich aus Messungen abgeleitet. Wo keine experimentellen Daten vorliegen, verwenden wir Resultate von theoretischen Arbeiten in der Literatur. Unser Modell ist in erster Linie ein semiempirisches chemisches Modell.

Der Einfluss des Staubes wird im Modell nur indirekt berücksichtigt, wie z.B. über die Wahl des radialen Elektronentemperaturprofils oder die Expansionsgeschwindigkeit. Es besteht aber die Möglichkeit, für ausgewählte Spezies fixe radiale Dichteprofile vorzugeben. Derartige fixe Dichteprofile sind dann sinnvoll, wenn für die betreffenden Spezies ein gemessenes Dichte-Radialprofil vorliegt. Ebenso kann man als Funktion des radialen Abstandes ausgedehnte Gasquellen simulieren, indem man im expandierenden Phasenraumelement für bestimmte Spezies zusätzliche Quellen einführt. Solche ausgedehnte Gasquellen entstehen z.B. dann, wenn Gas abgesetzt vom Kometenkern von Staubkörnern abdampft, welche durch die expandierende Koma über eine grössere Distanz mitgerissen werden [Eberhardt *et al.*, 1987b]. Weitergehende Wechselwirkungen zwischen Staubpartikeln und der gasförmigen Koma sind im Modell nicht vorgesehen.

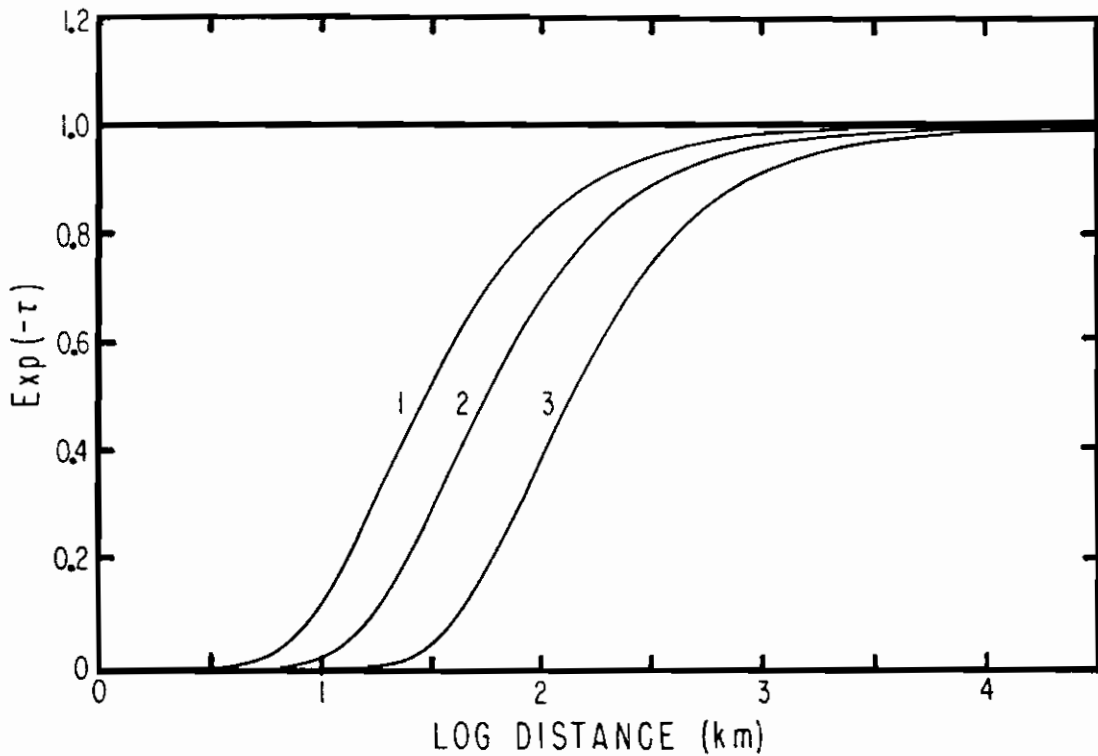
Der Bereich der Reaktionsgeschwindigkeiten für verschiedene Reaktionen erstreckt sich über mehrere Größenordnungen. Daher muss der oben beschriebene Lösungsalgorithmus sorgfältig überwacht werden. Über ein Kontrollfenster können Reaktionen erkannt werden, die bei der gewählten Schrittlänge zu schnell ablaufen. Die Länge des Zeitschrittes  $\Delta T$  zwischen zwei Iterationen wurde experimentell angepasst und steigt im wesentlichen exponentiell mit der Distanz an. Den Zeitschritt  $\Delta T$  setzen wir so an, dass die lineare Approximation für alle relevanten Reaktionen genügend genau ist, und die schnellen Reaktionen nicht verloren gehen. Durch Variation der Schrittlänge kann die numerische Stabilität der Lösung getestet werden. Damit der Rechenaufwand zeitlich bewältigbar ist, wurden die sehr schnellen, aber für die Gesamtrechnung unbedeutenden Reaktionen von angeregten Reaktanten in die entsprechenden Grundzustandsreaktionen umgewandelt.

Es sei an dieser Stelle noch darauf hingewiesen, dass in einer erweiterten Version des Simulationsprogrammes erste Versuche mit unterschiedlich schnell expandierenden Phasenraumelementen durchgeführt wurden. Ein solches mehrphasiges Modell wird dann nötig, wenn die Chemie über die Kontaktfläche hinaus weiterverfolgt wird.

### 3.2.2 Opazität

Als Opazität eines Objektes bezeichnet man dessen optische Transparenz. *Marconi und Mendis* [1984] haben für den Kometen P/Halley die Absorption der solaren UV-Strahlung durch die Koma für die drei Spektralbereiche  $J_1$  ( $145 \text{ nm} < \lambda \leq 186 \text{ nm}$ ),  $J_2$  ( $98.4 \text{ nm} < \lambda \leq 145 \text{ nm}$ ) und  $J_3$  ( $0 < \lambda \leq 98.4 \text{ nm}$ ) modelliert. Aus Figur 18 entnimmt man, dass die UV-Absorption im Abstand von  $>1000 \text{ km}$  zum Kometenkern praktisch verschwindet, und die Koma einer un abgeschirmten UV-Strahlung ausgesetzt ist. Das letzte NMS-Spektrum bei  $1030 \text{ km}$  wurde also noch in einem Bereich aufgenommen, in dem die Koma bezüglich UV-Strahlung optisch dünn war.

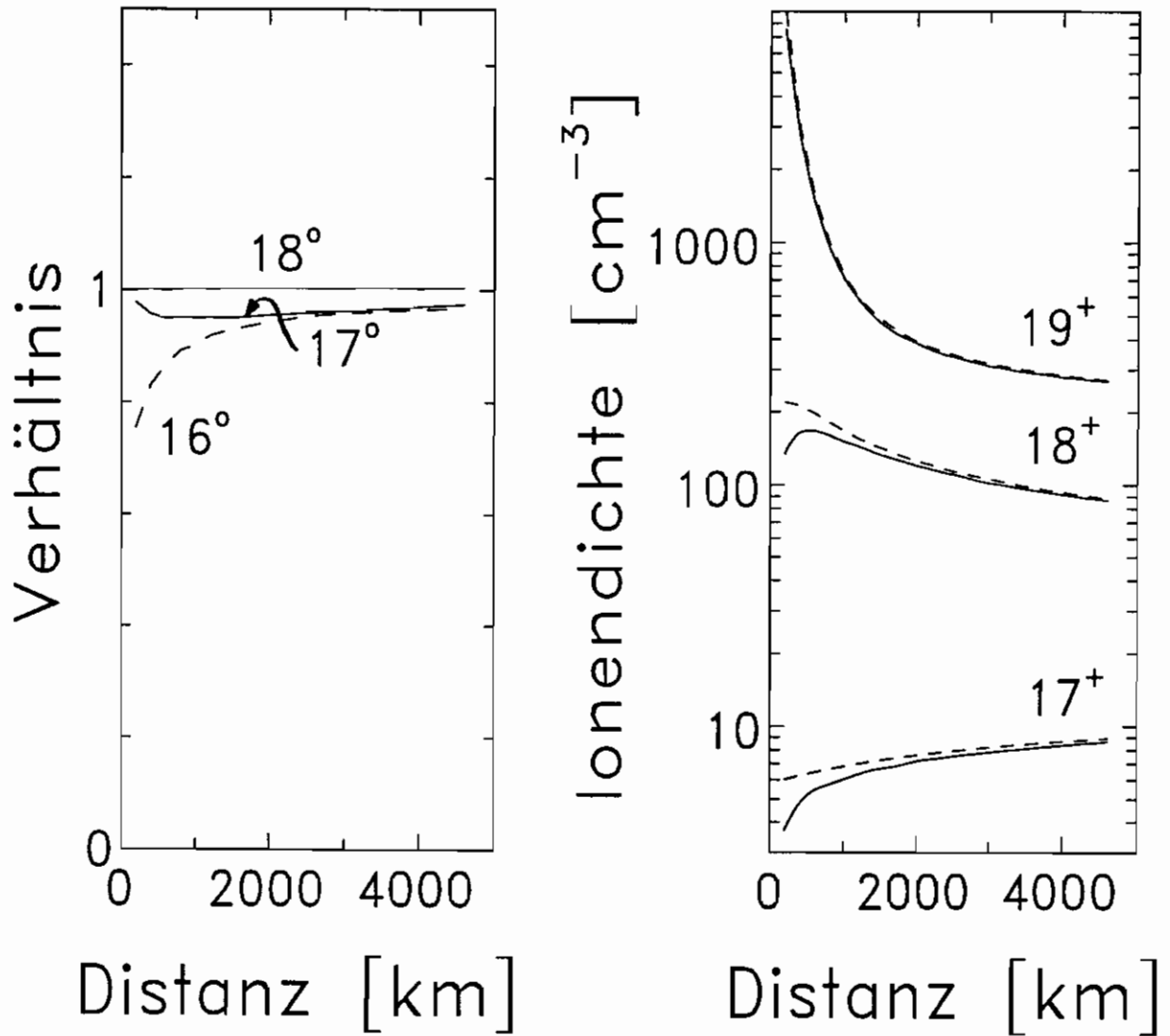
Photoionisationsprozesse können in den Regel nur energiereiche Photonen im Spektralbereich



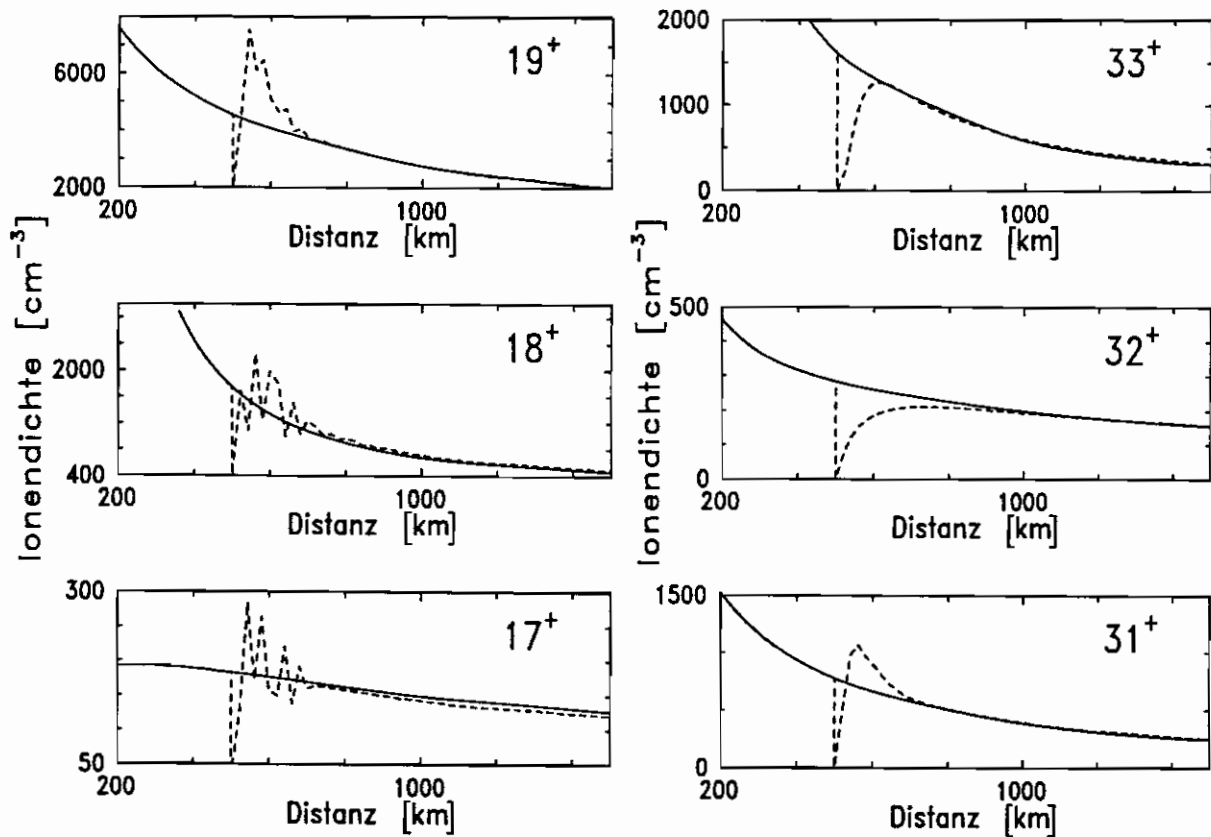
**Figur 18:** Gerechnete UV-Absorptionskoeffizienten  $\mu_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) im Kometen P/Halley als Funktion des Abstandes  $R$  zum Kometenkern, aufgeteilt auf drei Spektralbereiche  $J_1$  ( $145 \text{ nm} < \lambda \leq 186 \text{ nm}$ ),  $J_2$  ( $98.4 \text{ nm} < \lambda \leq 145 \text{ nm}$ ) und  $J_3$  ( $0 < \lambda \leq 98.4 \text{ nm}$ ) nach *Marconi und Mendis* [1984].

$J_3$  auslösen. Die Energie der Photonen in den Kanälen  $J_1$  und  $J_2$  reicht meist nur für Photodissoziationsprozesse aus. Es wurde eine Vergleichsrechnung für den für die NMS-Messungen interessanten Distanzbereich zwischen 1000 km bis 4500 km ausgeführt: Wir verglichen in einer Modellrechnung (mit Anfangsbedingungen bei 100 km) für eine Wasser-Ammoniak-Koma eine optisch dichte mit einer ungeschirmten Koma. Ab 1500 km unterscheiden sich die Resultate der beiden Modellrechnungen in den meisten Fällen um weniger als 5% (Figur 19).

Im UV-abgeschirmten Fall wurden hierbei in Kernnähe sämtliche Dissoziationsreaktionskonstanten mit dem Korrekturfaktor  $\mu_2$  für  $J_2$  und sämtliche Ionisationsreaktionskonstanten mit dem Korrekturfaktor  $\mu_3$  für  $J_3$  reduziert. Die Photonen, die hauptsächlich Moleküle dissoziieren, können noch zu über 90% bis 500 km zum Kometenkern vordringen (Spektralbereich  $J_1$  und  $J_2$ ). In der Koma stärker absorbiert werden die kurzwelligeren Photonen, die für die Photoionisation zuständig sind (Spektralbereich  $J_3$ ). Man kann jedoch zeigen, dass sich die Ionenpopulation sehr rasch einer veränderten Ionenproduktionsrate anpassen kann (Figur 20). Daher erkennt man ab 1500 km praktisch keinen Unterschied mehr zwischen den Ionendichten, die mit respektive ohne UV-Abschirmung gerechnet wurden.



**Figur 19:**  $\text{H}_2\text{O-NH}_3$ -Koma mit und ohne UV-Absorption durch die Koma. In der linken Figur ist das Verhältnis der gerechneten Gasdichte unter Einbezug der UV-Absorption relativ zur gerechneten Gasdichte ohne UV-Absorption dargestellt. Während Wasser ( $18^\circ$ ) unter Einbezug der UV-Absorption marginal weniger stark abgebaut wird als ohne UV-Absorption, weisen die primär über Dissoziationsprozesse gebildeten Gase auf den Massen 17 u/e und 16 u/e Defizite gegenüber der ungeschirmten Koma auf. Die rechte Figur zeigt die Situation bei den Ionen  $17^+$ ,  $18^+$  und  $19^+$ . Erwartungsgemäß nähern sich die Ionenprofile der Koma mit (ausgezogene Kurve) und ohne (strichlierte Kurve) UV-Absorption einander, sobald der Abschirmeffekt vernachlässigt werden darf.



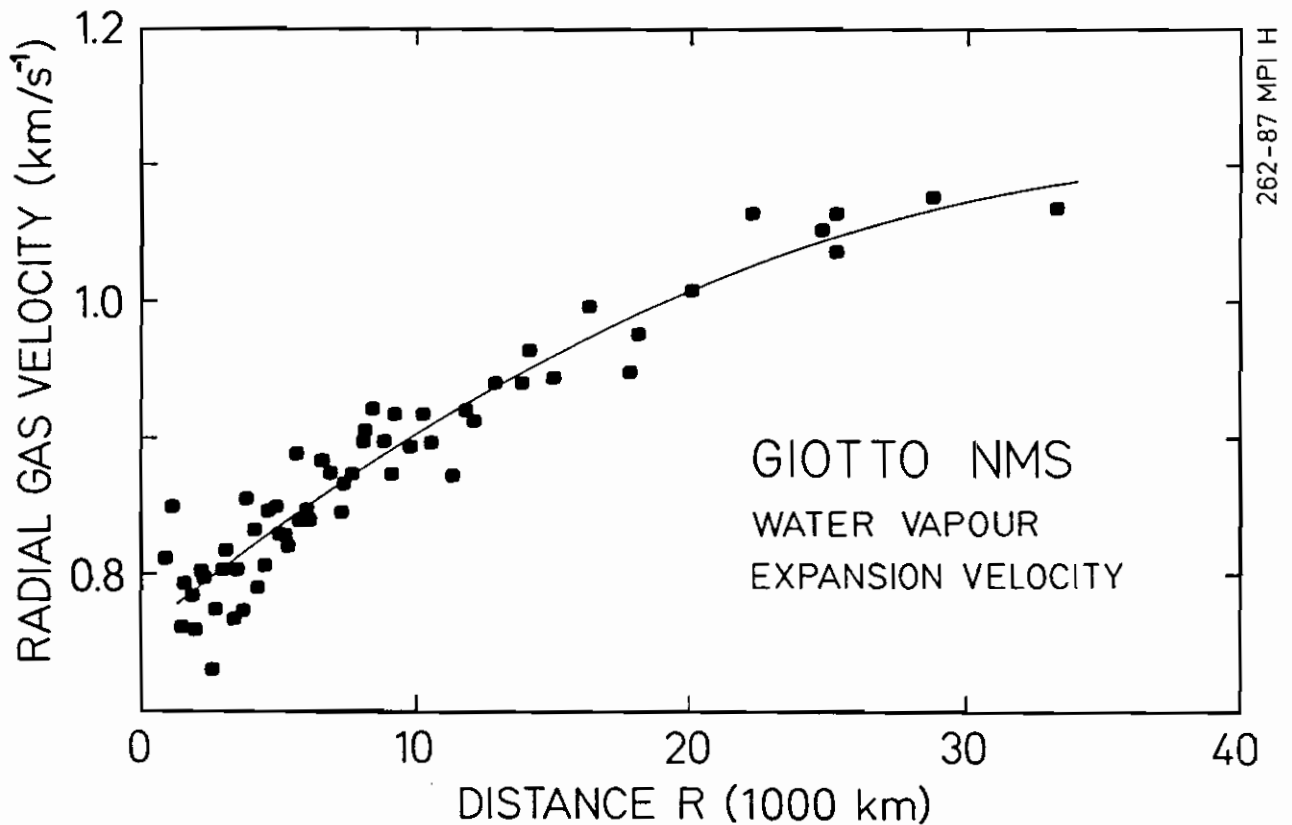
Figur 20: Dichteprofile von verschiedenen Ionen bei einer typischen Muttermolekülzusammensetzung (Kapitel 4.9). Die durchbrochenen Kurven entstehen, indem die Ionendichten bei  $R = 500$  km auf 0 zurückgesetzt werden. Die ausgezogenen Linien stellen die entsprechenden Ionenprofile ohne die Störung bei  $R = 500$  km dar.

### 3.2.3 Expansionsgeschwindigkeit

Die Expansionsgeschwindigkeit beeinflusst die Skalenlängen der einzelnen Spezies und damit auch die chemische Zusammensetzung der Koma als Funktion der Distanz zum Kometenkern. Wie bereits in früheren Kapiteln erwähnt wurde, dürfen die wegströmenden Gase in der Zone zwischen dem Nukleus und der Kontaktfläche als hydrodynamisches Medium behandelt werden. Über Stöße werden alle Gase auf einer annähernd gemeinsamen Bulk-Geschwindigkeit  $v(R)$  gehalten (siehe auch Kapitel 3.2.4). Einzig atomarer und molekularer Wasserstoff bilden hier eine Ausnahme: Als Dissoziationsprodukte von hauptsächlich Wasser erhalten H und  $H_2$  wegen ihrer kleinen Masse und des gleichzeitig zu erfüllenden Impulserhaltungssatzes

hohe Geschwindigkeiten. Atomarer Wasserstoff beispielsweise trägt aus der Reaktion  $\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{H} + \text{OH}$  eine Geschwindigkeit von  $18 \text{ km s}^{-1}$  davon [Crovizier, 1989]. Ausserdem benötigen H und  $\text{H}_2$  wegen ihrer im Vergleich zur Bulk-Masse geringen Masse durchschnittlich 9 bis 10 Stösse, bis sie in einer Wasseratmosphäre thermalisiert sind. Demgegenüber genügt dazu bei Molekülen, welche eine zur Bulk-Masse vergleichbare Masse besitzen, im Mittel ein einziger Stoss [Schmidt et al., 1988]. Für unser Modell verwenden wir als Bulk-Expansionsgeschwindigkeit  $v(R)$  der Gase das  $\text{H}_2\text{O}$ -Geschwindigkeitsprofil nach Lämmerzahl et al. [1987]. Krankowsky und Eberhardt [1989] haben durch die Daten des NMS-Energieanalysators über die ersten 30'000 km ein quadratisches Polynom  $a_0 + a_1 R + a_2 R^2$  gelegt. Dabei misst  $R$  die Distanz zum Kometenkern in [km]. Die entsprechenden Koeffizienten des Polynoms lauten:

$$\begin{aligned} a_0 &= 7.56 \cdot 10^{-1} \text{ km s}^{-1} \\ a_1 &= 1.67 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1} \\ a_2 &= -2.01 \cdot 10^{-10} \text{ km}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ (Man vergleiche auch mit Figur 21)} \end{aligned}$$

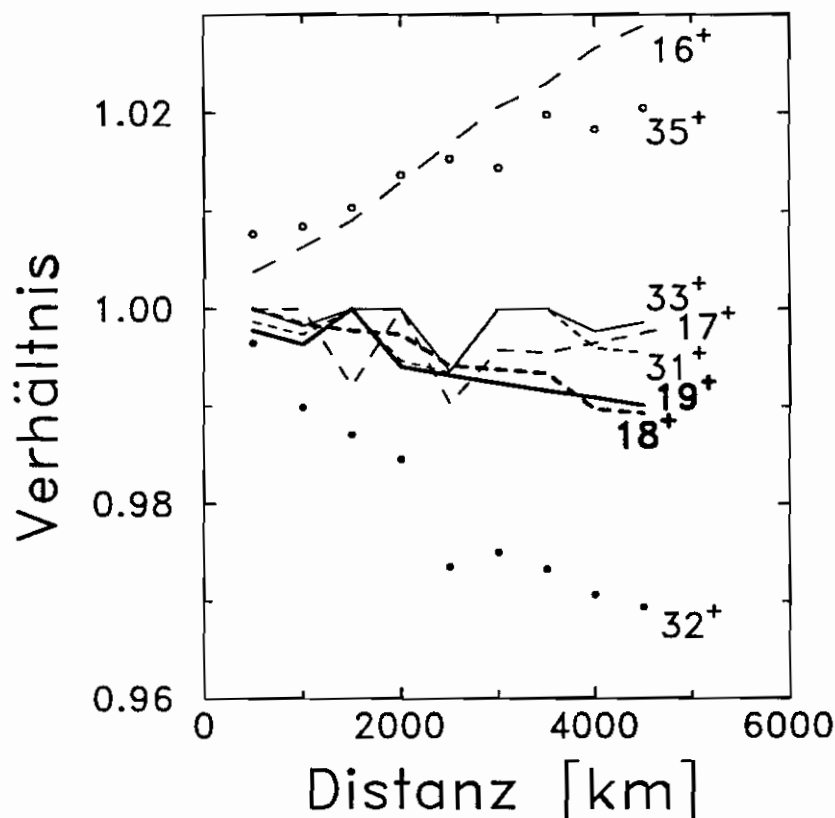


**Figur 21:**  $\text{H}_2\text{O}$ -Expansionsgeschwindigkeit  $v(R)$  nach Lämmerzahl et al. [1987]. Bis 30'000 km können die Daten mit dem Polynom  $a_0 + a_1 \cdot R + a_2 \cdot R^2$  approximiert werden, wobei  $a_0 = 7.56 \cdot 10^{-1} \text{ km s}^{-1}$ ,  $a_1 = 1.67 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  und  $a_2 = -2.01 \cdot 10^{-10} \text{ km}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [Krankowsky und Eberhardt, 1989].

Für Distanzen  $R$  unterhalb 1000 km existieren keine Geschwindigkeitsmessungen. Eine Extrapolation der Geschwindigkeit bis auf einen radialen Abstand von 100 km zum Kern ist vertretbar. Modellrechnungen von *Gombosi et al.* [1986] zeigen nämlich, dass die Expansionsgeschwindigkeit bereits in einer Entfernung von zwei Kernradien 80% des Endwertes erreicht hat.

Solange man nur die Kavität betrachtet, besitzen die Ionen und die neutralen Komponenten die gleiche Abströmgeschwindigkeit  $v(R)$  [*Lämmerzahl et al.*, 1987]. Damit lokal die Ladung erhalten bleibt, übernehmen auch die Elektronen diese Geschwindigkeit. Die Staubgeschwindigkeit spielt im hier betrachteten Modell keine Rolle und wird nicht weiter verfolgt.

In dieser Arbeit werden für die Wasserstoffspezies H und  $H_2$  keine gesonderten Expansionsgeschwindigkeiten eingeführt. Diese Vereinfachung ergibt für die Wassergruppe und die in dieser Arbeit untersuchten übrigen Spezies Abweichungen in den Teilchendichten, die auch im ungünstigsten Falle nur wenige Prozente betragen. Figur 22 vergleicht eine Koma mit typischer Zusammensetzung, in der die Wasserstoffkomponenten H und  $H_2$  vollständig thermalisiert werden, mit einer Koma, in der der gesamte atomare und molekulare Wasserstoff mit unendlich hoher Geschwindigkeit stossfrei aus der Kavität entweicht. Die letztere Situation wurde programmtechnisch so realisiert, dass die H- und  $H_2$ -Dichten im Verlaufe der Rechnung ständig auf Null gesetzt wurden.



**Figur 22:** Vergleich der Ionendichten zwischen einer Koma mit vollständig thermalisiertem Wasserstoff und einer Koma, in der die Wasserstoffkomponenten stossfrei entweichen können. Die Verhältnisse wurden relativ zur vollständig thermalisierten Koma gerechnet.

### 3.2.4 Temperaturen

Wir unterscheiden in der folgenden Zusammenstellung vier Arten von Temperaturen: Die Gastemperatur, die Ionentemperatur, die Elektronentemperatur und die Staubtemperatur:

#### *Gastemperatur:*

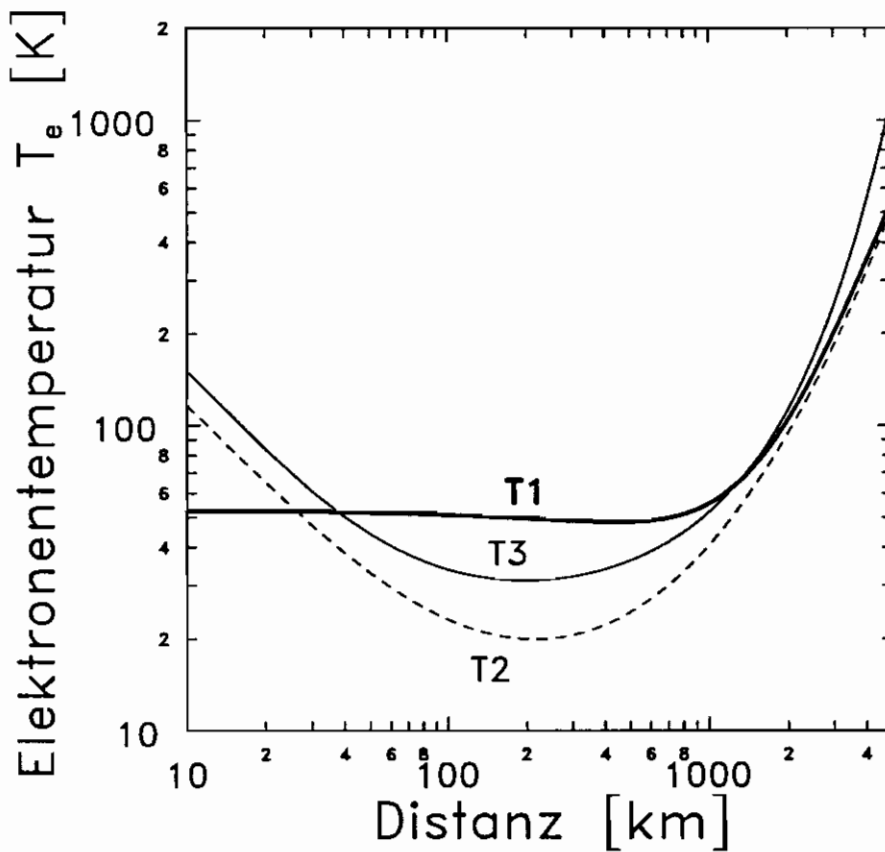
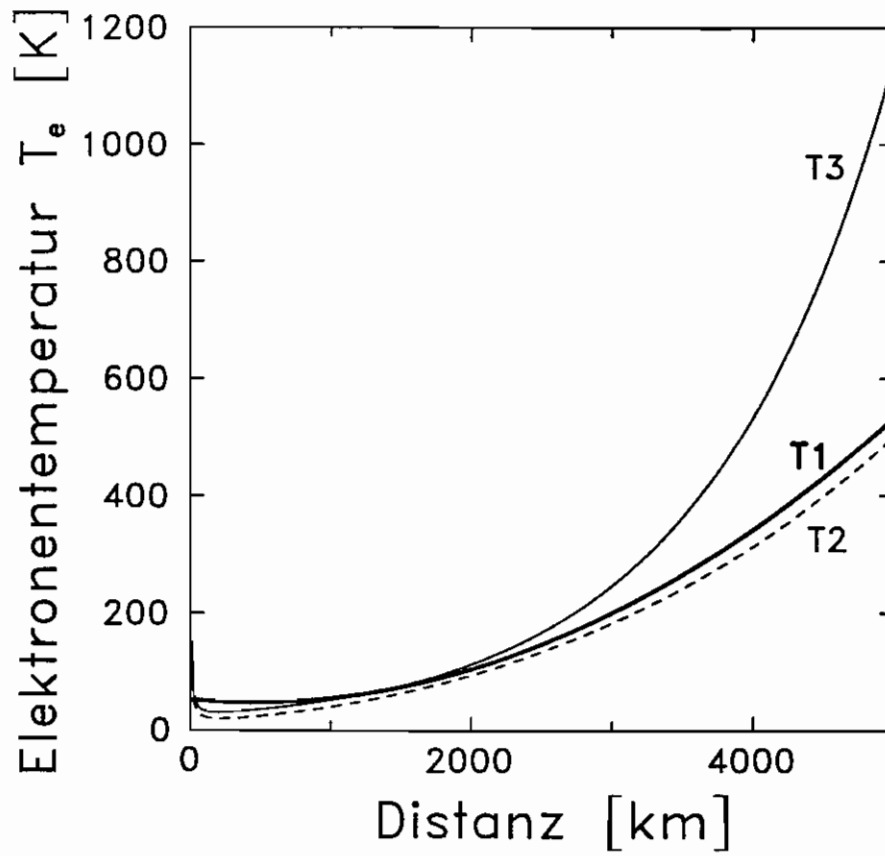
Der Abstand  $R_c$  zum Kern, ab dem ein radial wegfliegendes Molekül mit einer Wahrscheinlichkeit 1/2 stossfrei ins Vakuum entweicht, heisst Entkopplungsradius. Für  $R > R_c$  expandiert die Gaskoma im freien Molekularfluss. Zur Zeit der Giotto-Mission schätzen *A'Hearn und Festou* [1990] den Entkopplungsradius  $R_c$  für  $H_2O$  auf  $\sim 10^4$  km. Die Kontaktfläche befindet sich in einer Entfernung von  $\sim 4.5 \cdot 10^3$  km zum Nukleus, womit in der inneren Koma der Energieübertrag über Stösse gewährleistet ist. Abgesehen von einem für unsere Zwecke vernachlässigbaren Masseneffekt werden sämtliche neutralen Moleküle auf eine annähernd gemeinsame Gastemperatur thermalisiert. Davon ausgenommen sind - aus gleichen Gründen wie bei der Expansionsgeschwindigkeit  $v(R)$  - die leichten Spezies H und  $H_2$  [*Marconi und Mendis*, 1983].

Zum Teil enthalten Reaktionskonstanten von Neutral-Neutral-Reaktionen die Gastemperatur als Parameter. Für die Chemie der Koma sind diese Reaktionen aber unbedeutend. Insbesondere darf aus diesem Grunde auf ein aufwendigeres Zweiphasenmodell mit separater Wasserstofftemperatur verzichtet werden, ohne dass daraus ein grosser Fehler erwächst.

#### *Elektronentemperatur:*

Die Elektronentemperatur ist für die Chemie der Koma eine entscheidende Grösse. Mit der inversen Wurzel bestimmt die Elektronentemperatur die Elektronenrekombinationsrate. Elektronenrekombinationsprozesse wiederum sind die hauptsächlichsten Abbauprozesse für Ionen. Die Temperatur der kalten Elektronen wurde *nicht in situ* gemessen. Man ist daher auf Modellrechnungen angewiesen. Die Temperatur der freien Elektronen wird über inelastische Stösse mit polaren Molekülen, d.h. vor allem  $H_2O$ , an die Temperatur der Gase angeglichen [*Körösmezey et al.*, 1987]. Je nach Modell entkoppelt sich die Elektronentemperatur ab  $R = 2000 - 4000$  km von der Wassertemperatur und steigt dann an der Kontaktfläche schlagartig auf einige 1000 K an (Figur 23). Die  $H_2O$ -Temperaturkurve deckt sich also bis ca. 2000 km mit der Elektronentemperaturkurve. Die NMS-Messungen vor Ort ergeben lediglich eine obere  $H_2O$ -Temperaturschranke von  $T = 300$  K [*Lämmerzahl et al.*, 1987]. *Körösmezey et al.* [1986] kommen für die innere kometaäre Ionosphäre zum Schluss, dass die Ionentemperatur über der Gas- oder Elektronentemperatur liegen muss. Die NMS-Ionentemperaturen können daher auch als obere Limite der Elektronentemperatur betrachtet werden. Dies gilt natürlich nur für den Distanzbereich, für den Gas- und Elektronentemperatur gekoppelt sind.

Die Modellierung der Gas- und damit auch der Elektronentemperatur ist schwierig. Allen neueren Modellen gemeinsam ist ein Temperaturminimum in ca. 250 km Distanz zur Kernoberfläche. Durch die Expansion ins Vakuum wird bis ca. 250 km Wärmeenergie in Translationsenergie übergeführt. Zusätzlich abgekühlt wird die Koma durch Strahlungsverluste im Infrarot:  $H_2O$ - $H_2O$ -Kollisionen regen Rotationsniveaus der Wassermoleküle an, die durch das Aussenden von Infrarotphotonen abgeregt werden. Die emittierten Photonen gehen in



**Figur 23:** Elektronentemperatur als Funktion des Abstandes zum Kometenkern. Die ausgezogene Kurve zeigt das Elektronentemperaturprofil, wie es im Programm implementiert wurde (T1: In dieser Arbeit verwendetes Elektronentemperaturprofil, T2: *Marconi und Mendis* [1988], T3: *Ip und Axford* [1990]).



einer optisch dünnen Koma verloren. In Kernnähe ( $R < 100$  km), wo die  $H_2O$ -Koma optisch dicht ist, werden diese Strahlungsverluste aber verzögert, da durch mehrfache Reabsorption und anschließender Reemission die Photonenverweilzeit in der inneren Koma vergrößert wird [Xingfa und Mumma, 1992].

Nachdem das Temperaturminimum durchlaufen ist, steigt die Gastemperatur unter dem Einfluss des photolytischen Heizens an.

Der Einfluss von Staub auf den Temperaturverlauf ist schwer abzuschätzen. Der Kometenkern wird durch ein Staubhalo ( $R \approx 100$  km) gegen die direkte solare UV-Strahlung abgeschirmt [Marconi und Mendis, 1986]. Der Staub absorbiert die UV-Photonen und reemittiert sie als langwellige Infrarotphotonen. Durch die diffuse Infrarotstrahlung aus dem Staub kann das Gas in Kernnähe unter Umständen sogar stärker aufgeheizt werden als in einer entsprechenden staubfreien Koma. Während Modelle, die den Staub vernachlässigen, ein Temperaturminimum bei typischerweise einigen 10 K ergeben, sinkt die Temperatur in einer Koma mit hohem Staubanteil unter Extremannahmen nicht einmal mehr unter 100 K [Marconi und Mendis, 1986]. Einen ähnlich dramatischen Temperatureffekt erwartet auch Crifo [1990; Crifo und Stanina, 1991] durch Wasserrekondensation. Crifo [1990] argumentiert, dass die Gassublimation im Vakuum überkritische Gasphasen schafft, die in der Folge kondensieren und Kondensationsenergie freisetzen.

Aus einer Vielzahl publizierter Elektronentemperaturkurven aus Modellen wurde ein Radialprofil geschätzt (Figur 23). Das mit T1 bezeichnete Temperaturprofil lässt sich bis zur Kontaktfläche mit dem Polynom  $53 - 2.05 \cdot 10^{-2} \cdot R + 2.32 \cdot 10^{-5} \cdot R^2$  beschreiben, wobei  $R$  in Einheiten von [km] vorausgesetzt wird. Modelle, die den Staub nicht einbeziehen, ergeben in der Regel tiefere Temperaturminima als solche, die den Staub berücksichtigen. Da der Komet P/Halley eine nicht zu vernachlässigende Staubproduktion aufwies, werden Modelle, die den Staub berücksichtigen, bevorzugt. Der Anstieg der Elektronentemperatur vor der Kontaktfläche, d.h. ab ca. 4000 km, wird weniger steil gewählt als in den meisten Modellen, die auf P/Halley zugeschnitten sind. Damit wird erreicht, dass das Dichteprofil des Hauptions in der Koma,  $H_3O^+$ , die gemessene radiale Abhängigkeit zeigt. Stellt man sich auf den Standpunkt, dass die Gase primär vom Kern und nicht von einer 'ausgedehnten Quelle' (wie z.B. dem Staub) wegsublimieren, dann bestätigen die untersuchten Ionen mit Massen 33 u/e und 35 u/e die gewählte Elektronentemperatur. Es gelingt nämlich, mit der gewählten Elektronentemperatur beide Massenkanäle ausschliesslich mit einer Kernquelle zu erklären (siehe auch Kapitel 4.4 und 4.5).

#### *Ionen- und Staubtemperatur:*

Die Ionen- und die Staubtemperatur werden im Modell nicht verwendet. Es gibt keine Reaktionskonstanten, die die Temperatur der Ionen enthalten. Da der Staub im vorliegenden Modell nicht explizit behandelt wird, geht auch er nicht in die Rechnung ein.

### 3.3 Das Reaktionsnetzwerk

Kernstück des hier beschriebenen Modelles ist die Tabelle der Reaktionskonstanten, die im Moment über 3500 Reaktionen umfasst. In dieser Datenbank sind alle Reaktionen in einem vordefinierten Standardformat abgelegt: Für eine beliebige Reaktion Nr.  $i$  der Form



mit

$$\begin{aligned} \frac{d[A_i]}{dT} = \frac{d[B_i]}{dT} = \frac{d[C_i]}{dT} &= -[A_i] \cdot [B_i] \cdot [C_i] \cdot k_i \\ \frac{d[D_i]}{dT} = \frac{d[E_i]}{dT} = \frac{d[F_i]}{dT} &= [A_i] \cdot [B_i] \cdot [C_i] \cdot k_i \end{aligned} \quad (15)$$

sind maximal 3 Spezies als Edukte ( $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$ ) und 3 Spezies als Produkte ( $D_i$ ,  $E_i$ ,  $F_i$ ) zugelassen. Die eckigen Klammern symbolisieren Teilchendichten (z.B. Dichte von  $H_2O$ :  $[H_2O]$ , etc.).  $k_i$  [ $s^{-1}$ ] ist die Reaktionskonstante zur Reaktion Nr.  $i$  und hat die Form

$$k_i = \xi_i \cdot (a_i \cdot T + b_i) \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-\alpha_i} \cdot \exp\left(\frac{-\beta_i}{T}\right) \quad (16)$$

Die Parameter  $\xi_i$ ,  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $\alpha_i$  und  $\beta_i$  sind Konstanten, die von der Reaktion  $i$  abhängig sind.  $T$  ist je nach Reaktion entweder die Gastemperatur oder die Elektronentemperatur. Die Reaktionskonstanten  $k_i$  sind in einer verallgemeinerten Arrhenius-ähnlichen Standardform dargestellt. Nicht benötigte Parameter werden entweder Null ( $a_i$  oder  $b_i$ ,  $\alpha_i$  und/oder  $\beta_i$ ) oder Eins ( $\xi_i$  oder  $a_i$  oder  $b_i$ ) gesetzt.

Wir unterscheiden fünf Klassen von Reaktionen. Aufgezählt nach absteigender Bedeutung sind dies: Photoreaktionen, Reaktionen mit Ionen, Neutral-Neutral-Reaktionen, Elektronenstossreaktionen und Reaktionen mit angeregten Zuständen (Tabelle 7).

#### *Photoreaktionen:*

Die wichtigsten chemischen Reaktionen in der Koma sind die Photoreaktionen. Fast alle in dieser Arbeit verwendeten Photoreaktionskonstanten stammen aus einem Vorabdruck von *Huebner et al.* [1989]. *Huebner et al.* unterscheiden in ihrer Zusammenstellung zwischen Reaktionskonstanten bei einem Sonnenaktivitätsminimum und solchen bei einem Sonnenaktivitätsmaximum. Ergänzt wurde die Liste der Photoreaktionen mit Werten aus der Publikation von *Schmidt et al.* [1988]. Weiter wurden vereinzelte Photoreaktionen aus erst kürzlich veröffentlichten Arbeiten hinzugefügt.

Es sei an dieser Stelle insbesondere auch auf die geschätzten Reaktionskonstanten für Polyoxymethylenverbindungen ( $-CH_2-O-CH_2-O-CH_2-O-$ ) hingewiesen. Verschiedene Autoren [*Huebner et al.*, 1987; *Mitchell et al.*, 1987; *Moore und Tanabé*, 1990] vermuten, dass die in der Koma des Kometen P/Halley beobachtete Formaldehydquelle ausserhalb des Kometen-

**Tabelle 7:** Die verschiedenen Reaktionstypen mit Beispielen

<i>Photoreaktionen:</i>	
Photoionisation	$\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{e}^-$
Photodissoziation	$\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{OH} + \text{H}$
Photodissoziative Ionisation	$\text{H}_2\text{O} + h\nu \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H} + \text{e}^-$
<i>Reaktionen mit Ionen:</i>	
Ladungsaustausch	$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{CO}^+$
Ion-Atom-Austauschreaktionen	$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{O}$
Elektronenrekombination durch Photonenemission	$\text{H}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{H} + h\nu$
Dissoziative Elektronenrekombination	$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{e}^- \rightarrow \text{OH} + \text{H}$
Strahlungsstabilisierte Neutral-Ion-Anlagerung	$\text{C}^+ + \text{H} \rightarrow \text{CH}^+ + h\nu$
<i>Neutral-Neutral-Reaktionen:</i>	
Neutral-Neutral-Umlagerung	$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
Rekombination Neutraler über Dreikörperstöße	$\text{H} + \text{H} + \text{M} \rightarrow \text{H}_2 + \text{M}$
Strahlungsstabilisierte Rekombination von Neutralen	$\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{OH} + h\nu$
Ionisation durch Neutral-Neutral-Anlagerungen	$\text{CH} + \text{O} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{e}^-$
<i>Elektronenstossreaktionen:</i>	
Ionisation durch Elektronenstoss	$\text{H}_2\text{O} + \text{e}^- \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + 2\text{e}^-$
Dissoziation durch Elektronenstoss	$\text{H}_2\text{O} + \text{e}^- \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{e}^-$
Dissoziative Ionisation durch Elektronenstoss	$\text{H}_2\text{O} + \text{e}^- \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H} + 2\text{e}^-$
<i>Reaktionen mit angeregten Zuständen:</i>	
Abregung über spontane Photonenemission	$\text{O}(^1\text{D}) \rightarrow \text{O} + h\nu$
Abregung über stossinduzierte Photonenemission	$\text{O}(^1\text{D}) + \text{O}_2 \rightarrow \text{O} + \text{O}_2 + h\nu$

kerns sowie die periodische Häufung der Beiträge auf den Masselinien 61, 75, 91, 105 u/e in den Spektren des Giotto-Massenspektrometers PICCA [Mitchell *et al.*, 1987] Indizien für solche Polyoxymethylenketten (POM-Ketten) sind. Da es keine Labormessungen über Photoreaktionen von POMs gibt, war man wiederum auf Schätzungen angewiesen. Wir nehmen an, dass die POM-Ketten zwischen jeder O- und CH<sub>2</sub>-Gruppe mit gleicher Wahrscheinlichkeit  $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  auseinanderbrechen können, und die Photoionisationswahrscheinlichkeit ca.  $1 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  beträgt. Die Endstelle lassen wir jeweils auf der einen Seite offen (-CH<sub>2</sub>-O-). Die andere Seite der Molekülkette bleibt entweder offen oder es hängt ein H-Atom an der freien Bindungsstelle. Berücksichtigt werden POM-Ketten mit bis zu fünf -CH<sub>2</sub>-O-Sequenzen (POM5). Das POM2 (-CH<sub>2</sub>-O-CH<sub>2</sub>-O-) zerfällt schliesslich in zwei Formalmoleküle (H<sub>2</sub>CO). Die ionisierten POM-Ketten und deren Fragmente rekombinieren mit  $k = 2.5 \cdot 10^{-7} \cdot (T_e/300)^{-0.5}$  mit Elektronen, wobei T<sub>e</sub> die Elektronentemperatur ist.

*Reaktionen mit Ionen, Neutral-Neutral-Reaktionen:*

Als Grundlage diente die Reaktionskonstanten-Sammlung UMIST [Millar *et al.*, 1991]. Diese Datenbank wurde speziell für die Modellierung von interstellaren Molekülwolken aufgebaut. Alle Ionen-Elektronen-, Ionen-Neutral- sowie Neutral-Neutral-Reaktionen könne direkt übernommen werden. Vor allem die Wasserchemie sowie einige weitere, für die Kometenchemie wichtige Reaktionsgruppen wurden ergänzt beziehungsweise verfeinert, indem auch Reaktionstabellen von Schmidt *et al.* [1988], Viala [1986] und Anicich und Huntress [1986] einbezogen wurden.

**Tabelle 8:** Liste aller Muttermoleküle, Radikale und Ionen, deren Chemie ausreichend vollständig in der Datenbank vertreten ist. Ionen, die kursiv gedruckt sind, werden in der Reaktionstabelle nicht oder nur unvollständig berücksichtigt. Der Übersicht halber sind die Polyoxymethylenverbindungen in der Tabelle *nicht* enthalten.

Masse [u/e]	Mögliche Mutter- moleküle	Neutrale Radikale	Ionen
1		H	H <sup>+</sup>
2	H <sub>2</sub>		H <sub>2</sub> <sup>+</sup>
3			H <sub>3</sub> <sup>+</sup>
12		C	C <sup>+</sup>
13		CH	CH <sup>+</sup>
14		CH <sub>2</sub> , N	CH <sub>2</sub> <sup>+</sup> , N <sup>+</sup>
15		CH <sub>3</sub> , NH	CH <sub>3</sub> <sup>+</sup> , NH <sup>+</sup>
16	CH <sub>4</sub>	O, O( <sup>1</sup> S), O( <sup>1</sup> D), NH <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub> <sup>+</sup> , O <sup>+</sup> , NH <sub>2</sub> <sup>+</sup>
17	NH <sub>3</sub>	OH	NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> , OH <sup>+</sup> , CH <sub>5</sub> <sup>+</sup>
18	H <sub>2</sub> O		H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> , NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>
19			H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
24		C <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> <sup>+</sup>
25		C <sub>2</sub> H	C <sub>2</sub> H <sup>+</sup>
26	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	CN	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CN <sup>+</sup>
27	CHN, HNC	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	CHN <sup>+</sup> , HNC <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup>
28	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , N <sub>2</sub> , CO		C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> <sup>+</sup> , N <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CO <sup>+</sup> , HCNH <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> NC <sup>+</sup>
29		C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , HCO	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup> , HCO <sup>+</sup> , HOC <sup>+</sup> , N <sub>2</sub> H <sup>+</sup>
30	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , H <sub>2</sub> CO, NO		C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> , NO <sup>+</sup> , CH <sub>4</sub> N <sup>+</sup>
31		HNO	HNO <sup>+</sup> , H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup>
32	O <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> OH	S, S( <sup>1</sup> S), S( <sup>1</sup> D)	O <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CH <sub>3</sub> OH <sup>+</sup> , S <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> NO <sup>+</sup>
33		HS, O <sub>2</sub> H	O <sub>2</sub> H <sup>+</sup> , HS <sup>+</sup> , CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup>
34	H <sub>2</sub> S, H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>		H <sub>2</sub> S <sup>+</sup>
35			H <sub>3</sub> S <sup>+</sup>
36		C <sub>3</sub>	C <sub>3</sub> <sup>+</sup>
37			C <sub>3</sub> H <sup>+</sup>
38		CCN	CCN <sup>+</sup> , CNC <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> <sup>+</sup>
39			C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup> , CCNH <sup>+</sup>
40	H <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> <sup>*</sup>		C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> <sup>+</sup> , CH <sub>2</sub> CN <sup>+</sup>
41	CH <sub>3</sub> CN		CH <sub>3</sub> CN <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> HO <sup>+</sup>
42	CH <sub>2</sub> CO <sup>*</sup> (?)	NCO	NCO <sup>+</sup> , H <sub>4</sub> C <sub>2</sub> N <sup>+</sup> , CH <sub>2</sub> CO <sup>+</sup>
43	HNCO <sup>*</sup>		HNCO <sup>+</sup> , CH <sub>3</sub> CO <sup>+</sup>
44	CO <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> CHO <sup>*</sup> , N <sub>2</sub> O	CS	CO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , CH <sub>3</sub> CHO <sup>+</sup> , CS <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> <sup>+</sup>
45		HCS	HCS <sup>+</sup> , CO <sub>2</sub> H <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sup>+</sup>
46	H <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> CS, NO <sub>2</sub>	NS	H <sub>2</sub> CO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> CS <sup>+</sup> , NO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , NS <sup>+</sup>
47			CHOOH <sub>2</sub> <sup>+</sup> , H <sub>3</sub> CS <sup>+</sup> , HNS <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> OH <sup>+</sup> , C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> O <sup>+</sup>
48	SO		SO <sup>+</sup> , C <sub>4</sub> <sup>+</sup>
49			HSO <sup>+</sup> , C <sub>4</sub> H <sup>+</sup>
50			C <sub>4</sub> H <sub>2</sub> <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> N <sup>+</sup>
51	HC <sub>3</sub> N		HC <sub>3</sub> N <sup>+</sup> , C <sub>4</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup>
52	C <sub>2</sub> N <sub>2</sub> <sup>*</sup>		H <sub>2</sub> C <sub>3</sub> N <sup>+</sup>
53			C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup> , HC <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
54			C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> O <sup>+</sup>
55			C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
56	C <sub>2</sub> S		C <sub>2</sub> S <sup>+</sup>
57			HC <sub>2</sub> S <sup>+</sup>

(Fortsetzung Tabelle 8)

Masse [u/e]	Mögliche Mutter- moleküle	Neutrale Radikale	Ionen
60	OCS		OCS <sup>+</sup>
61			HOCS <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sup>+</sup>
62			C <sub>3</sub> H <sub>2</sub> <sup>+</sup>
63			C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> <sup>+</sup> , HC <sub>4</sub> N <sup>+</sup>
64	S <sub>2</sub> , SO <sub>2</sub>		S <sub>2</sub> <sup>+</sup> , SO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> C <sub>4</sub> N <sup>+</sup>
65			HS <sub>2</sub> <sup>+</sup> , HSO <sub>2</sub> <sup>+</sup> , C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>
67			H <sub>3</sub> S <sub>2</sub> <sup>+</sup>
69			HC <sub>3</sub> S <sup>+</sup>
76	CS <sub>2</sub>		CS <sub>2</sub> <sup>+</sup>
77			HCS <sub>2</sub> <sup>+</sup>
81			HC <sub>4</sub> S <sup>+</sup>

\*: Nur Photoreaktionen und Elektronenrekombination  
 (?): Photoreaktionen unsicher

#### Elektronenstossreaktionen:

In die Datensammlung aufgenommen wurden nur die wichtigsten Elektronenstossreaktionen nach Schmidt et al. [1988].

#### Reaktionen mit angeregten Zuständen:

Angeregte Zustände spielen in der Kometenchemie nur eine untergeordnete Rolle. Aus programmtechnischen Gründen sind alle kurzlebigen, angeregten Zustände (Lebensdauer < 1 s) in Grundzustandsreaktionen umgewandelt worden. Nur C(<sup>1</sup>S), C(<sup>1</sup>D), O(<sup>1</sup>S), O(<sup>1</sup>D), S(<sup>1</sup>S) und S(<sup>1</sup>D) wurden berücksichtigt.

Tabelle 8 fasst alle neutralen Muttermoleküle und die daraus abgeleiteten Radikale zusammen, von denen in der Datenbank ausreichend viele Reaktionen vorhanden sind. Insbesondere wurde untersucht, ob die neutralen Moleküle über Photoreaktionen vollständig in ihre atomaren Ionen zerlegt werden können. Auch die entsprechenden Elektronenrekombinationsreaktionen müssen in der Datensammlung vorhanden sein. In jedem Falle wurde abgeklärt, ob es Reaktionen mit Wasserkomponenten, sei dies H<sub>2</sub>O, H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> oder H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> gibt. Nach Massen geordnet zeigt die Tabelle 8 auch alle Ionen, die aus den zugelassenen neutralen Spezies entstehen. Zu den kursiv gedruckten Ionen gibt es entweder keine oder nur unvollständige Reaktionswege. Da es sich bei diesen Ionen meistens um selten produzierte Komponenten handelt, fallen sie für die Gesamtrechnung nicht ins Gewicht.

### 3.4 Wasser in der Koma des Kometen P/Halley

Aus den Daten des NMS-Experimentes geht hervor, dass das Gas, das vom Kometenkern wegströmt, zu rund 80% (Volumenprozent) aus Wasser besteht [Krankowsky und Eberhardt, 1989]. Zum Zeitpunkt des Fluges der Raumsonde Giotto durch die Koma des Kometen P/Halley war H<sub>2</sub>O somit die mit Abstand häufigste Gaskomponente in der inneren Koma. Die Dynamik und die chemische Zusammensetzung der Koma werden daher durch das Wasser

entscheidend beeinflusst.

Mit Hilfe des NMS-Massenanalytators kann die absolute H<sub>2</sub>O-Dichte und die Lebensdauer von H<sub>2</sub>O gegen Photodestruktion bestimmt werden. Die radial wegfliegenden neutralen H<sub>2</sub>O-Moleküle werden nach und nach durch das solare UV-Licht photodissoziiert und zu einem geringeren Anteil auch ionisiert. Zusätzliche Verluste (oder Gewinne) können durch chemische oder ionenchemische Prozesse entstehen. Bei Wasser sind diese jedoch für das H<sub>2</sub>O-Dichteprofil vernachlässigbar. Weitere Zerstörungsprozesse sind in Gebieten zu erwarten, in denen Wechselwirkungen mit dem Sonnenwind stattfinden. Hochenergetische Ionen und Elektronen, sowie Plasmaprozesse können dort zusätzlich zu den solaren UV-Photonen die neutralen Moleküle zerstören. Wiederum wird dadurch das H<sub>2</sub>O-Dichteprofil über den hier betrachteten Distanzbereich von 100 km bis ca. 70'000 km nicht feststellbar beeinträchtigt. Selbst bei ca. 70'000 km kometozentrischer Distanz ist die Wasserdichte mit  $\sim 10^4$  H<sub>2</sub>O-Molekülen pro cm<sup>3</sup> um Grössenordnungen höher als die Sonnenwinddichte, die im ungestörten Fall ca. 3-10 Protonen pro cm<sup>3</sup> beträgt.

Für die folgenden Ausführungen setzen wir erneut eine kugelsymmetrische und optisch dünne Koma voraus. Da die untersuchten Teilchen nur eine endliche Lebensdauer  $\tau$  haben, werden sie in der Zeit  $dT$  mit der Wahrscheinlichkeit  $dT/\tau$  zerstört. Mit dem Kometenkern als Zentrum ist der Teilchenfluss durch eine Kugeloberfläche mit Radius  $(R + dR)$  gleich dem Teilchenfluss durch die Kugeloberfläche mit Radius  $R$ , abzüglich der Verluste während der Flugzeit  $dT$  im Zwischenvolumen der beiden konzentrischen Kugeloberflächen. Wenn  $v(R) = dR/dT$  ist, folgt:

$$4\pi \cdot (R+dR)^2 \cdot n(R+dR) \cdot v(R+dR) = 4\pi \cdot R^2 \cdot n(R) \cdot v(R) - \frac{dT}{\tau} 4\pi \cdot R^2 \cdot n(R) \cdot v(R) \quad (17)$$

Dabei bezeichnet  $n(R)$  die lokale Dichte im Abstand  $R$  zum Kometenkern und  $v(R)$  die momentane Geschwindigkeit. Nach kurzer Umformung erhält man

$$d(R^2 \cdot n(R) \cdot v(R)) = -\frac{dT}{\tau} \cdot R^2 \cdot n(R) \cdot v(R) \quad (18)$$

und daraus

$$d \ln(R^2 n v) = -\frac{dT}{\tau} \quad (19)$$

In Kapitel 4.7 wird diese Differentialgleichung in der Form

$$\frac{1}{R^2} \cdot \frac{d \{n(R)v(R)R^2\}}{dR} = -\frac{n(R)}{\tau} \quad (20)$$

verwendet. Indem alle Grössen als Funktion der Zeit dargestellt werden, ergibt eine Integration von (20) über die Zeit von  $T_o = 0$  bis  $T$ :

$$n(T) = \frac{n_o v_o R_o^2}{v(T) R^2(T)} \cdot e^{-\frac{T}{\tau}} \quad (21)$$

Dabei sind  $n_o = n(T_o)$  die Dichte,  $v_o = v(T_o)$  die Geschwindigkeit und  $R_o = R(T_o)$  der Abstand zum Zentrum des Kometenkerns zur Referenzzeit  $T_o = 0$ .

In Figur 24 ist in Abhängigkeit des Koma-Alters  $T$  die  $H_2O$ -Dichte dargestellt, wie sie vom NMS-Massenanalysator gemessen wurde. Auf der logarithmischen Abszisse ist die Dichte  $n(R)$  multipliziert mit dem 'Kugelschalenterm'  $4\pi \cdot R^2(T) \cdot v(T)$  aufgetragen. Zu einer gegebenen  $H_2O$ -Lebensdauer  $\tau(H_2O)$  gehört somit die Kurve

$${}^{10}\log\{4\pi R^2(T)v(T)n(T)\} = {}^{10}\log(4\pi R_o^2 v_o n_o) - \frac{1}{\tau(H_2O) \cdot \ln(10)} \cdot T \quad (22)$$

mit

$$Q_o = 4\pi R_o^2 v_o n_o \quad (23)$$

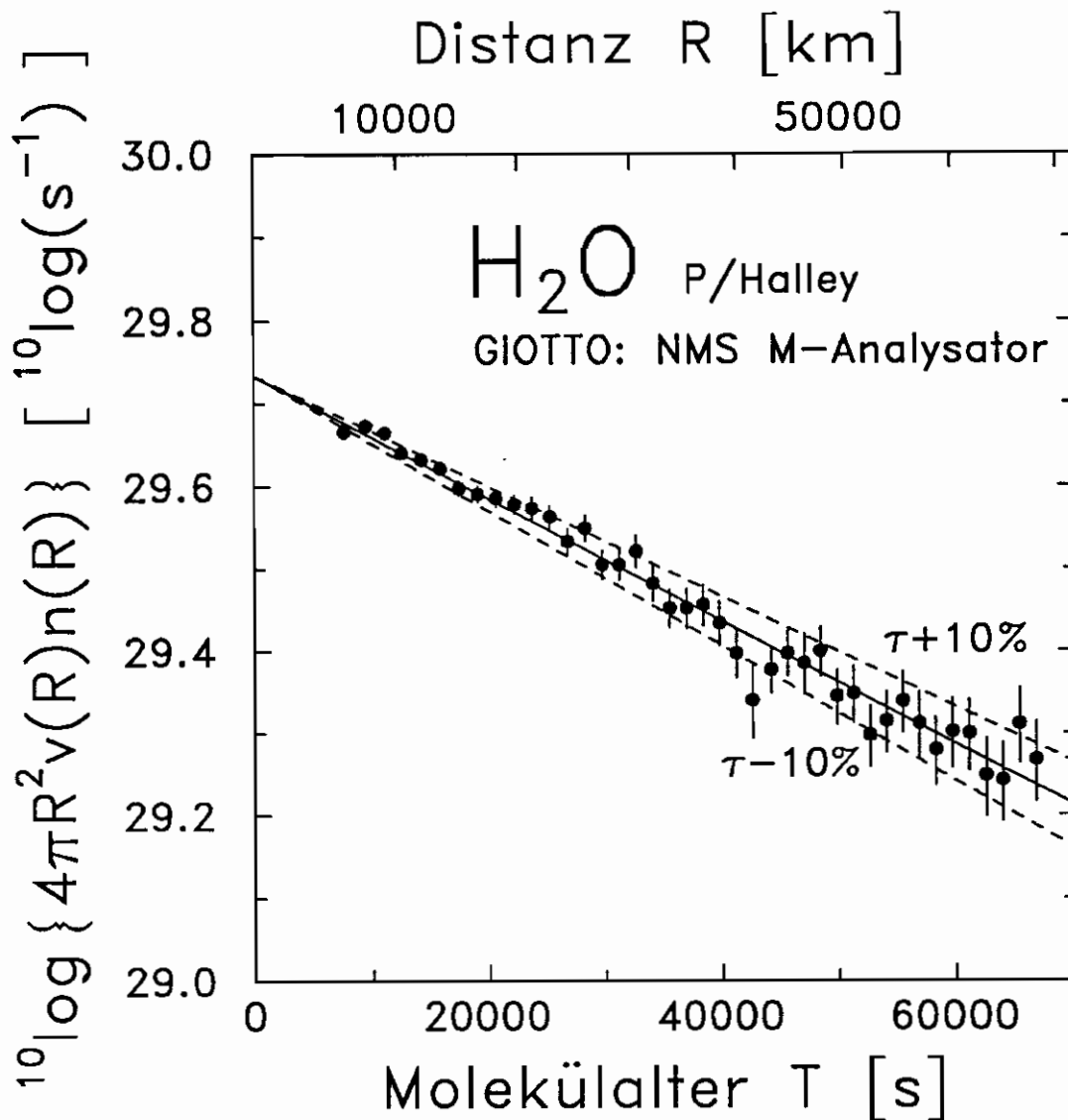
Wenn  $R_o$  der mittlere Radius des Nukleus ist, dann ist der Term (23) in der Gleichung (22) die  $H_2O$ -Kernproduktionsrate. Im zweiten Term von Gleichung (22) steckt bis auf einen bekannten Proportionalitätsfaktor die inverse Lebensdauer  $\tau(H_2O)$ . Spezies, die in der expandierenden Gas-Staub-Mischung keine chemischen Reaktionen eingehen, d.h. eine unendlich grosse Lebensdauer aufweisen, erscheinen in dieser Darstellung als horizontale 'Dichte'-Profile. Eine konstante, endliche  $H_2O$ -Lebensdauer  $\tau(H_2O)$  ergibt eine fallende Gerade. Der Wert für die Lebensdauer von  $H_2O$  beträgt gemäss Figur 24  $\tau(H_2O) = 5.8 \cdot 10^4$  s. Der Kehrwert ist die zugehörige Reaktionskonstante  $k(H_2O) = 1.72 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Huebner *et al.* [1989] erhalten in ihrer ausführlichen Tabelle über  $H_2O$ -Reaktionen bei einem Sonnenaktivitätsminimum eine totale  $H_2O$ -Photodestruktionskonstante  $k_{min}(H_2O) = 1.45 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ , bei einem Sonnenaktivitätsmaximum eine solche von  $k_{max}(H_2O) = 2.97 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ . Die angegebenen Reaktionskonstanten beziehen sich auf einen Sonnenabstand von 0.90237 AE.

Führt man eine normierte Aktivitätszahl  $\kappa$  ein, die bei einem Sonnenaktivitätsminimum den Wert 0 und bei einem Sonnenaktivitätsmaximum den Wert 1 annimmt, dann kann aus der Photodestruktionskonstanten  $k(H_2O)$  mit  $k_{min}(H_2O) \leq k(H_2O) \leq k_{max}(H_2O)$  gemäss Ausdruck

$$\kappa = \frac{k(H_2O) - k_{min}(H_2O)}{k_{max}(H_2O) - k_{min}(H_2O)} \quad (24)$$

eine Aktivität zwischen 0 und 1 zugeordnet werden. Aus  $k(H_2O) = 1.72 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  folgt eine Aktivität  $\kappa \approx 0.18$ . Am Tage des Giotto-Vorbeifluges (13. März 1986) befand sich die Sonne in einem Sonnenaktivitätsminimum (Figur 25).

Dass die Messungen eine  $H_2O$ -Lebensdauer ergeben, die ein leicht über dem Sonnenaktivitätsminimum liegendes UV-Spektrum voraussetzen, kann auf verschiedene Ursachen zurückgeführt werden:



**Figur 24:** H<sub>2</sub>O-Fluss als Funktion des Molekülalters, gemessen mit dem NMS-Massenanalysator. Die ausgezogene Kurve entspricht einer Lebensdauer von  $\tau(\text{H}_2\text{O}) = 5.8 \cdot 10^4$  s. Die unterbrochenen Kurven oberhalb und unterhalb gehören zu  $\pm 10\%$  erhöhter respektive reduzierter H<sub>2</sub>O-Lebensdauer. Siehe auch Text (Figur in Anlehnung an Krankowsky und Eberhardt [1989]).

- Der UV-Fluss im Sonnenaktivitätsminimum wird tatsächlich um ca. 25% systematisch unterschätzt. Mehr als 1/3 aller H<sub>2</sub>O-Photoreaktionen werden durch Photonen der solaren Lyman  $\alpha$  Emissionslinie ausgelöst [Crovisier, 1989]. In der Aeronomie hat sich  $3 \cdot 10^{11}$  Photonen  $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  als Standardwert für den Lyman  $\alpha$  Photonenfluss bei 1 AE heliozentrischer Distanz und niedriger Sonnenaktivität durchgesetzt [Simon und Tobiska, 1991]. Barth *et al.* [1990] bestimmten für die Zeit der Giotto-Mission einen relativ tiefen Photonenfluss von  $2.7 \cdot 10^{11}$  Photonen  $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-2}$  (Figur 25). Sie weisen zugleich auch darauf hin, dass gerade im Sonnenminimum das solare 10.7 cm Radioband ein schlechter



Index für die Lyman  $\alpha$  Linie sei. *VonHoosier et al.* [1988] haben demgegenüber im August 1985 während der Spacelab 2 Mission mit ihrem Solar Ultraviolet Spectral Irradiance Monitor  $3.97 \cdot 10^{11}$  Photonen  $s^{-1} cm^{-2}$  gemessen. Zu diesem Zeitpunkt herrschte ebenfalls annähernd ein Sonnenaktivitätsminimum. *VonHoosier et al.* liegen mit ihrem Wert um  $\sim 26\%$  über dem Standardwert von  $3 \cdot 10^{11}$  Photonen  $s^{-1} cm^{-2}$  [*Simon und Tobiska*, 1991].

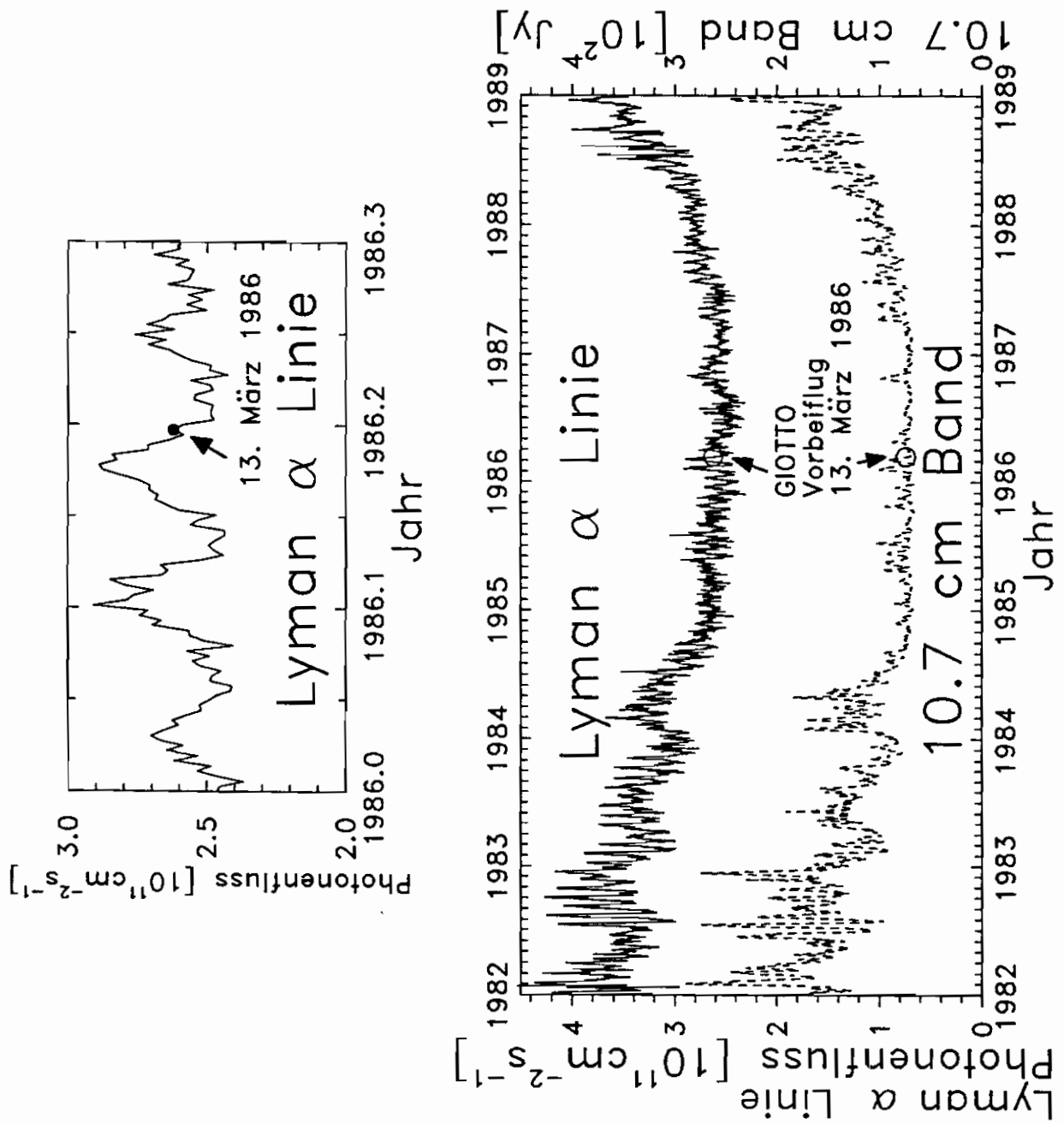
- Zur Bestimmung von  $\tau(H_2O)$  wird ein Distanzbereich von einigen 1000 km bis  $\sim 70'000$  km beigezogen. Es kann ein Zeiteffekt als Folge einer zeitlich sich ändernden  $H_2O$ -Kernproduktion nicht ausgeschlossen werden. Der erwähnte Distanzbereich entspricht einer Zeit von etwas mehr als 19 h. Aus optischen Langzeitbeobachtungen der  $C_2$ -Banden [*Millis und Schleicher*, 1986] sind ganz deutlich periodische Intensitätsschwankungen sichtbar. Sie werden als Kernrotationseffekt interpretiert. Die Messungen zeigen aber, wenn überhaupt, höchstens eine zeitlich abnehmende Kernproduktion; dies würde aber auf zu lange Lebensdauern führen.

Es gibt keine Hinweise auf eine  $H_2O$ -Produktion ausserhalb des Nukleus. Nach Figur 24 beträgt die  $H_2O$ -Kernproduktionsrate  $Q_o(H_2O) = 5.4 \cdot 10^{29} s^{-1}$ . Diese Produktionsrate fällt praktisch mit dem in der Zeitschrift *Nature* veröffentlichten, provisorischen Wert von  $5.5 \cdot 10^{29} s^{-1}$  zusammen [*Krankowsky et al.*, 1986b]. Die Auswertung in dieser Arbeit berücksichtigt die von *Lämmerzahl et al.* [1987] ermittelte Expansionsgeschwindigkeit und beruht auf einem revidierten Wirkungsquerschnitt  $\sigma(H_2O, H_2O^+, 90 eV)$  für Elektronenstossionisation von  $H_2O$ . Hierbei ist  $\sigma(H_2O, H_2O^+, 90 eV)$  der Wirkungsquerschnitt zur Reaktion  $H_2O + e^- \rightarrow H_2O^+ + 2e^-$  bei 90 eV Elektronenstrahlenergie (90 eV entsprechen dem NMS HeV-Modus). Da nur Ionen massenspektrometrisch untersucht werden können, müssen die neutralen  $H_2O$ -Moleküle zuerst mittels einer Elektronenquelle durch Elektronenstoss ionisiert werden. Dabei geht der Wirkungsquerschnitt  $\sigma(H_2O, H_2O^+, 90 eV)$  proportional in die Absolutdichte ein (siehe auch Tabelle 9).

**Tabelle 9:** Wirkungsquerschnitt für Elektronenstossionisation von Wassermolekülen.  $\sigma(H_2O, H_2O^+, 90 eV)$  ist der Wirkungsquerschnitt zur Reaktion  $H_2O + e^- \rightarrow H_2O^+ + 2e^-$  und  $\sigma_{tot}(H_2O, 90 eV)$  der Wirkungsquerschnitt zur Reaktion  $H_2O + e^- \rightarrow$  Summe aller produzierter Ionen inklusive Fragmentionen. Wenn vom gleichen Autor auch der  $N_2$ -Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{tot}(N_2, 90 eV)$  oder  $\sigma(N_2, N_2^+, 90 eV)$  vorliegen, werden die  $H_2O$ -Messungen auf die  $N_2$ -Wirkungsquerschnitte  $\sigma_{tot}(N_2, 90 eV) = 2.49 \cdot 10^{-16} cm^2$  oder  $\sigma(N_2, N_2^+, 90 eV) = 1.90 \cdot 10^{-16} cm^2$  normiert [*Meier*, 1988].

\*: graphisch bestimmter Wert

Referenz	Energie E des Elektro- nenstrahles [eV]	$\sigma(H_2O, H_2O^+, E)$ [ $10^{-16} cm^2$ ]	$\sigma(H_2O, H_2O^+, E)$ renormalisiert [ $10^{-16} cm^2$ ]	$\sigma_{tot}(H_2O, E)$ [ $10^{-16} cm^2$ ]	$\sigma_{tot}(H_2O, E)$ renormalisiert [ $10^{-16} cm^2$ ]
<i>Lampe et al.</i> , 1957	75	-	-	2.96	2.56
<i>Schutten et al.</i> , 1966	100	1.32	1.32	2.01	2.01
<i>Märk und Egger</i> , 1976	92	1.08	1.22	-	-
<i>Reljić et al.</i> , 1986	90	-	-	2.24*	2.24*
Mittelwert			1.27		2.27



**Figur 25:** Lyman  $\alpha$  ( $\lambda = 121.6 \text{ nm}$ ) Photonenfluss, gemessen mit dem *Solar Mesosphere Explorer* [Barth et al., 1990]. Der Pfeil zeigt auf den Tag des Giotto-Vorbeifluges am Kometen P/Halley (13. März 1986). Die unterbrochene Kurve ist der Lyman  $\alpha$  Photonenfluss, abgeleitet aus dem solaren 10.7 cm Radioband.

Es sei  $\sigma_{\text{tot}}(\text{H}_2\text{O}, 90 \text{ eV})$  der totale Zählratenwirkungsquerschnitt, der ein Mass dafür ist, wieviele Ionen insgesamt bei 90 eV Elektronenenergie produziert werden. Aus einem Mittel verschiedener Literaturwerte folgt  $\sigma_{\text{tot}}(\text{H}_2\text{O}, 90 \text{ eV}) = 2.27 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  (Tabelle 9). Da bei der Elektronenstossionisation neben der Ionisation auch dissoziative Ionisationsprozesse auftreten, muss auch die relative Häufigkeit der gebildeten Fragmentionen bekannt sein. In Tabelle 10 sind die relativen  $\text{H}_2\text{O}$ -Fragmenthäufigkeiten verschiedener Autoren aufgeführt.

**Tabelle 10:** Relative Häufigkeit von Fragmentionen aus  $\text{H}_2\text{O}$  bei Elektronenstossionisation.

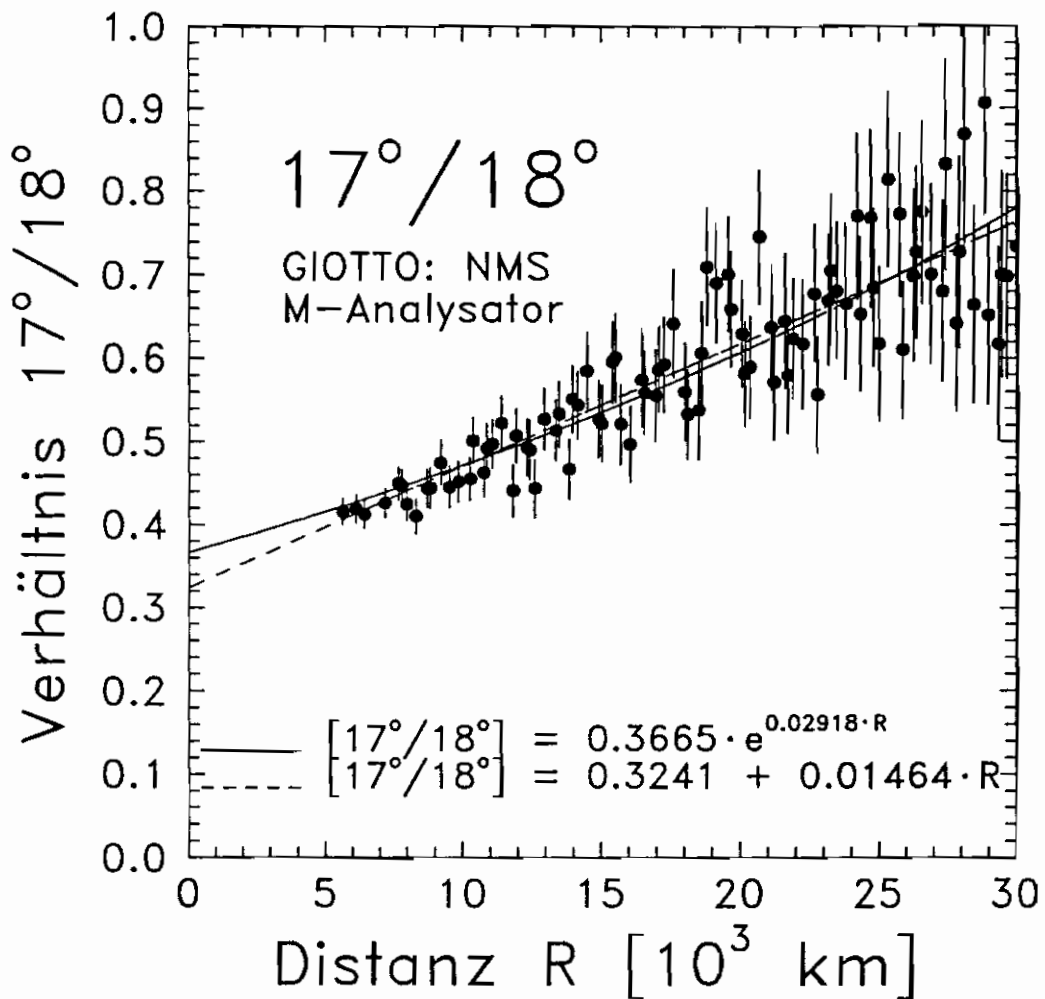
Referenz	Energie des Elektronenstrahles [eV]	relative Häufigkeit [%]				
		$\text{H}_2\text{O}^+$	$\text{OH}^+$	$\text{O}^+$	$\text{H}_2^+$	$\text{H}^+$
<i>Mann et al.</i> , 1940	100	100	23.2	2.0	0.07	5.0
<i>Schutten et al.</i> , 1966	100	100	25.8	2.65	0.30	29.6
<i>Rudolph und Melton</i> , 1966	100	100	23.1	2.0	-	4.3
<i>Barrington</i> , 1967	70	100	35	5	-	-
<i>Gomet und Kästler</i> , 1975	90	100	34.5 <sup>*)</sup>	4.1 <sup>*)</sup>	-	17.8 <sup>*)</sup>
<i>Schmitt</i> , 1990 (Labormessungen mit dem NMS)	87	100	36	4	-	-
M-Analysator, in situ <sup>*)</sup>	90	100	35	-	-	-
In dieser Arbeit verwendete relative Häufigkeit:		100	35	4	0	25

<sup>\*)</sup> graphisch bestimmter Wert

<sup>\*)</sup> siehe Figur 26

Für die 18 u/e, 17 u/e und 16 u/e Masselinie gibt es Labormessungen mit dem E-Analysator (siehe auch Tabelle 10: *Schmitt*, 1990). Aus den *in situ* Neutralmessungen des NMS M-Analysators folgt ein Zählratenverhältnis  $[17 \text{ u/e}]/[18 \text{ u/e}] = 0.35$ , welches die Laborwerte des E-Analysators bestätigt (Figur 26). Der  $\text{NH}_3$ -Beitrag zur Masse 17 u/e verschwindet im Extrapolationsfehler, wenn für das  $[\text{NH}_3]/[\text{H}_2\text{O}]$ -Verhältnis eine obere Schranke von 2% gesetzt wird.

Am kritischsten ist die Bestimmung der  $\text{H}^+$ -Häufigkeit. Die Literaturwerte divergieren für dieses Fragmention zwischen 4% und 30%. Die kometären Gase strömen mit  $\sim 68 \text{ km s}^{-1}$  Relativgeschwindigkeit durch das NMS, dessen Geometrie nach dem Flight-Through-Prinzip aufgebaut ist. Bei derart hohen Relativgeschwindigkeiten erreichen selbst die meisten der leichten  $\text{H}^+$ -Ionen den Detektor, obwohl sie beim Elektronenstoß als Folge der Impulserhaltung zum Teil hohe Quergeschwindigkeiten zur Sollrichtung erhalten. Das geschätzte  $[\text{H}^+]/[\text{H}_2\text{O}^+]$ -Verhältnis beträgt  $\sim 25\%$ . Unter Berücksichtigung der relativen Fragmenthäufigkeiten leitet man aus dem Wirkungsquerschnitt ein  $\sigma(\text{H}_2\text{O}, \text{H}_2\text{O}^+, 90 \text{ eV}) = 1.38 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  ab. Dieser Wert ist innerhalb 15% konsistent mit den Literaturwerten von *Schutten et al.* [1966] und *Märk und Egger* [1976] in Tabelle 9.



**Figur 26:** Das Signalstärkenverhältnis auf der Masse 17 u/e relativ zur Masse 18 u/e im HeV-Modus des NMS-Massenanalysators (in situ Neutralmessungen, 90 eV Elektronenenergie). Der y-Achsenabschnitt liefert das Fragmentierungsverhältnis  $[\text{OH}^+]/[\text{H}_2\text{O}^+]$  bei Elektronenstossionisation von  $\text{H}_2\text{O}$ .

Zusammenfassend fixiert das  $\text{H}_2\text{O}$ -Radialprofil zwei Parameter: Einerseits folgt aus der  $\text{H}_2\text{O}$ -Kernproduktionsrate  $Q_o = 5.4 \cdot 10^{29} \text{ s}^{-1}$  eine lokale Wasserdichte in 100 km Abstand zum Kometennukleus von  $5.7 \cdot 10^9 \text{ H}_2\text{O}$ -Molekülen pro  $\text{cm}^3$ . Andererseits wird für alle Spezies, bei denen nach Sonnenaktivität getrennte Photoreaktionskonstanten verfügbar sind, mit der Aktivitätszahl  $\kappa \approx 0.18$  interpoliert.

## 4 Interpretation von NMS-Ionenspektren mit Hilfe des Komamodelles

### 4.1 Strategie der Auswertung

Die NMS-Ionenquelle erzeugt durch Elektronenstoss aus den neutralen kometären Molekülen nur teilweise die entsprechenden, einfach ionisierten Molekülionen. Daneben entsteht unweigerlich auch die ganze Palette von Fragmentionen. Daher lassen sich mit Hilfe der NMS Neutralspektren *alleine* nur in wenigen Fällen (wie z.B. H<sub>2</sub>O) Moleküle eindeutig identifizieren. Vielfach belegen nämlich Fragmentionen von verschiedenen Molekülen die gleiche Massenlinie. In solchen Situationen ist eine Identifikation der Ionen ohne die Zuhilfenahme weiterer Informationen meist nicht möglich.

Bei den Ionenmessungen entfällt die vorgängige Elektronenstossionisation. Damit tritt in den Ionenspektren keine instrumentell bedingte Fragmentbildung auf. Die Ionenmessungen sind aber mit dem Nachteil verbunden, dass sich aus ihnen nur über ein Modell die zugehörige, letztlich interessierende Gaszusammensetzung ableiten lässt. Als Modell verwenden wir in dieser Arbeit das Komamodell aus Kapitel 3.

Wie bereits in früheren Kapiteln erwähnt wurde, beschränken wir uns vorderhand auf die Ionenmessungen innerhalb der Kavität. In diesem Distanzbereich sind die dynamischen Prozesse noch einigermaßen überblickbar. Die Neutralspektren dienen als Kontrolle und als zusätzliche Identifikationshilfe. Erst wenn die Muttermolekülzusammensetzung einmal im wesentlichen geklärt ist, wird es längerfristig gesehen möglich werden, in den Ionenmessungen ausserhalb der Kontaktfläche die dynamischen und die chemischen Prozesse auseinanderzuhalten, respektive ihre Wechselwirkungen zu untersuchen.

Im ganzen Kapitel 4 beziehen sich alle Angaben immer, wenn nicht anders präzisiert wird, auf den Bereich zwischen dem Kern und der Kontaktfläche.

Die Rechenzeit zur Modellierung einer Koma mit einer komplizierten chemischen Zusammensetzung dauert typischerweise ca. 4 Stunden (PC 80386, 20 MHz). Die Kombinationsmöglichkeiten von Anfangsbedingungen sind beliebig gross. Aus praktischen Gründen ist es nicht möglich, jede denkbare Vorgabe von Randbedingungen einzeln durchzurechnen. Es wurde deshalb ein Näherungsverfahren entwickelt. In Sekundenschnelle können mit diesem Verfahren aus einer anfänglichen Gaszusammensetzung die daraus resultierenden Ionenspektren als Funktion des Abstandes  $R$  zum Kometenkern generiert werden. Das folgende Arbeitsschema zeigt, wie mit Hilfe dieser linearen Approximationsmethode die Molekülzusammensetzung *iterativ* ermittelt wird.

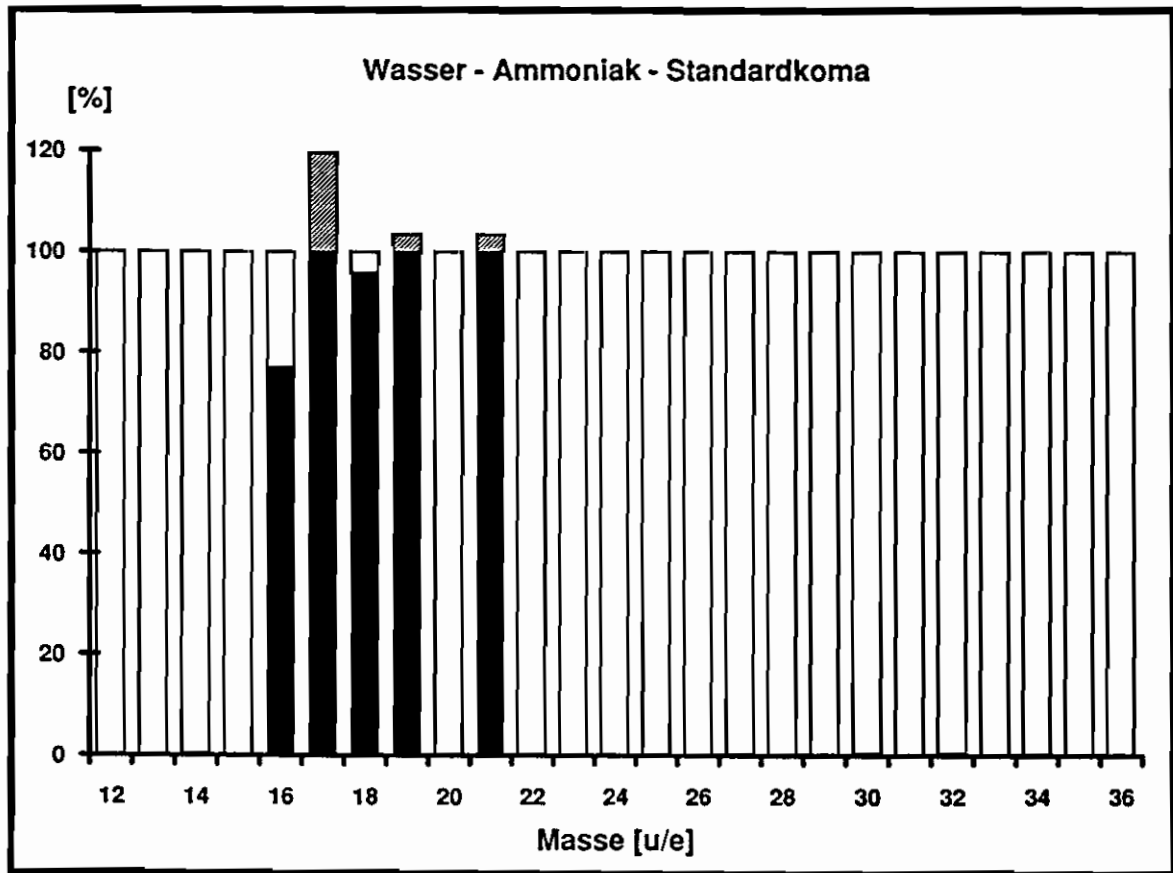
- (1) Simulation einer "Standardkoma": Im Abstand von  $R = 100$  km zum Kometenkern stellen wir für unsere Standardkoma eine Liste von Molekülen mit entsprechenden

Teilchendichten zusammen. Diese Liste muss im wesentlichen zwei Bedingungen erfüllen: Einerseits darf die Zusammenstellung nur Moleküle enthalten, von denen bereits die Kernproduktionsraten und eventuelle ausgedehnte Quellen aus den NMS-Daten bestimmt worden sind. Andererseits müssen die gewählten Moleküle einen möglichst hohen Anteil der beobachteten Ionen in der Koma erklären. Insbesondere dürfen weitere Moleküle, die nicht in der Standardkoma enthalten sind, die gerechneten Ionenpopulationen der Standardkoma nur schwach verändern. "Schwach" ist dabei im Sinne von Punkt (2) gemeint.

Umfangreiche Vorabklärungen zeigten, dass die Ionenchemie von Wasser und Ammoniak ziemlich unbeeinflusst durch alle übrigen Moleküle untersucht werden darf (siehe auch Kapitel 4.2).  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{NH}_3$  bestimmen die Ionenhäufigkeiten in der Wassergruppe (Massen 17 u/e - 21 u/e) in erster Näherung losgekoppelt von allen übrigen Spezies. Das Hinzufügen weiterer Moleküle reduziert primär nur die  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Häufigkeit. Aus diesen Gründen wurde als erste Standardkoma eine  $\text{H}_2\text{O}$ - $\text{NH}_3$ -Koma verwendet. Näheres zur  $\text{H}_2\text{O}$ - und  $\text{NH}_3$ -Häufigkeit im Kometen P/Halley folgt im nächsten Kapitel.

- (2) Der Standardkoma wird nun ein neutrales, bislang in der Standardzusammensetzung nicht enthaltenes Molekül  $A$  beigefügt. Die anfängliche Teilchendichte von  $A$  bei  $R = 100$  km betrage 1% der  $\text{H}_2\text{O}$ -Teilchendichte. Für jede Massenlinie in den Ionenspektren wird in Abhängigkeit des radialen Abstandes  $R$  die Differenz zwischen der um die Spezies  $A$  erweiterten Standardkoma und der Standardkoma selbst berechnet. Diese Differenzen werden als Korrekturbeiträge ("1%-Beitrag") zu den verschiedenen Massenlinien als Funktion von  $R$  in eine Matrix abgelegt. Wir nehmen an, dass die zusätzliche Anwesenheit von Molekülen der Sorte  $A$  lediglich eine lineare Störung der Standardkoma bewirkt. Wenn also in der anfänglichen Molekülzusammensetzung das Molekül  $A$  mit einer Häufigkeit von  $x\%$  relativ zur Wasserhäufigkeit auftritt, darf in den Ionenspektren der Standardkoma bei einer festgehaltenen Distanz  $R$  der "1%-Beitrag" von  $A$  multipliziert mit dem Faktor  $x$  addiert werden. Dieses Additionsprinzip funktioniert, falls die relativen Häufigkeiten der untersuchten Muttermoleküle im Vergleich zur Teilchendichte in der Standardkoma klein sind. Dann nämlich kommt den Reaktionen mit anderen, ebenfalls in 1%-Stärke und schwächer vertretenen Molekülen nur eine untergeordnete Rolle zu. Weiter ist die Additivität streng genommen nur dann gut erfüllt, wenn die Häufigkeit der Spezies  $A$  grössenordnungsmässig um 1% herum liegt. Selbst mit der äusserst einfachen  $\text{H}_2\text{O}$ - $\text{NH}_3$ -Koma ist das Additionsprinzip schon recht gut erfüllt (Figur 27; die Diskussion der Figur 27 erfolgt später im Text).
- (3) Zu möglichst vielen Molekülen  $A$ , sucht man die entsprechenden 1%-Beiträge bei immer gleicher Zusammensetzung der Standardkoma. Die gerechneten Massenlinien der Standardkoma werden anschliessend mit Ionen der 1%-Beiträge additiv ergänzt, bis sie die *gemessene* Höhe erreichen (Figur 27). Wir nehmen an, dass die untersuchten neutralen Moleküle ausschliesslich vom Kern stammen, also nicht nach einem längeren Transport erst in grosser Entfernung zum Kometenkern über eine "ausgedehnte Quelle" in die Koma abgegeben werden. So gesehen muss es gelingen, dass die gleiche anfängliche Molekülzusammensetzung ( $R = 100$  km), mit der sich die Massenlinien bei einer festen Distanz  $R_{ref}$  additiv auffüllen lassen, auch die Massenspektren in anderen Distanzen erklärt. Es wird erst dann vom Grundsatz der reinen Kernquelle abgewichen, wenn die

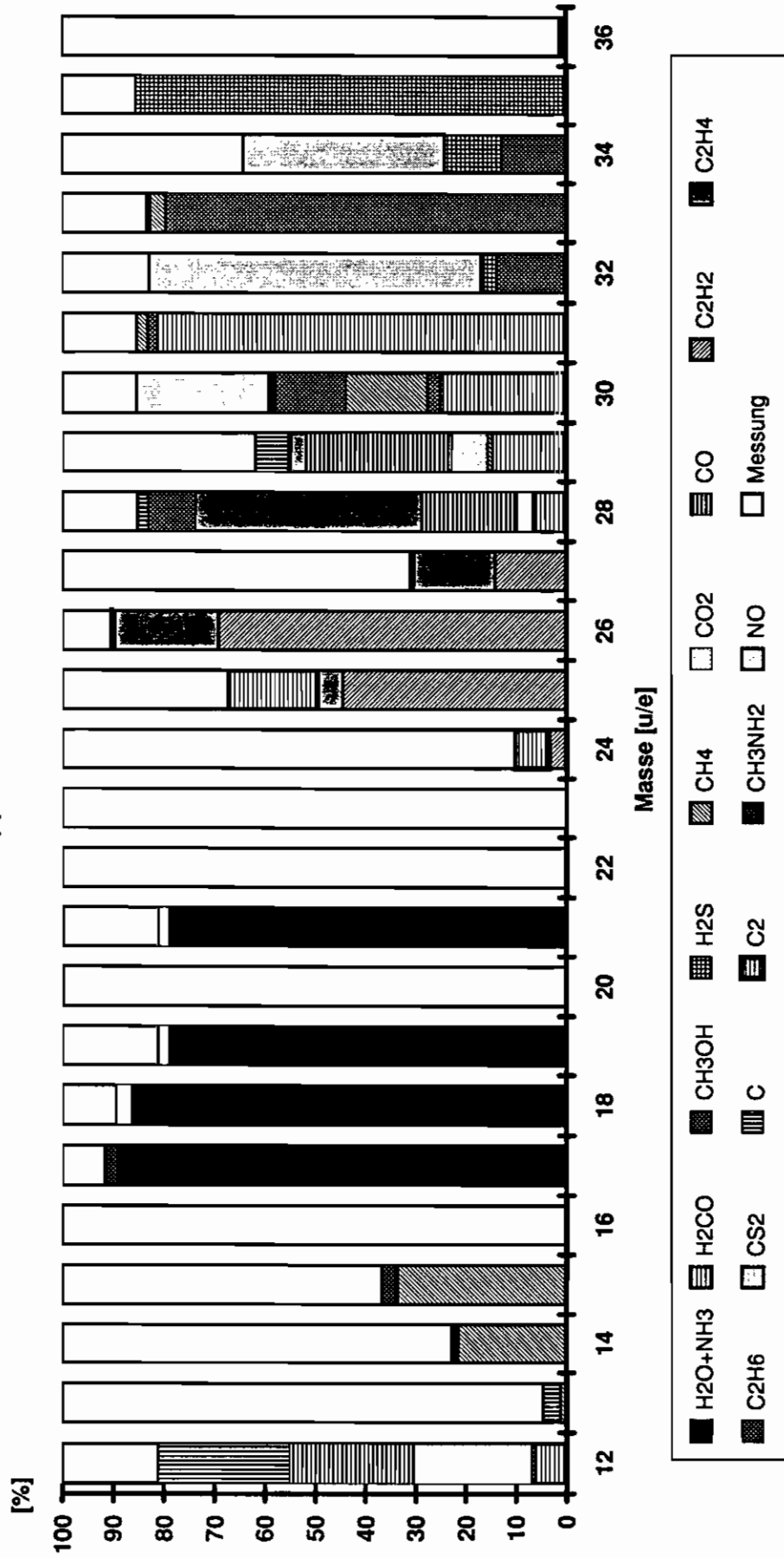
Figur 27: Ein Beispiel zur linearen Approximationsmethode. Die offenen Balken stellen die gemessenen Massenlinien dar, normiert auf jeweils 100%. Alle gezeigten Spektren sind Ionenspektren. Die Messdaten stammen vom NMS M-Analysator, aufgenommen bei  $R = 2460$  km. Die Korrektur des Detektor-Yields erfolgte nur näherungsweise nach Tabelle 6 unter Kapitel 2.5.4.



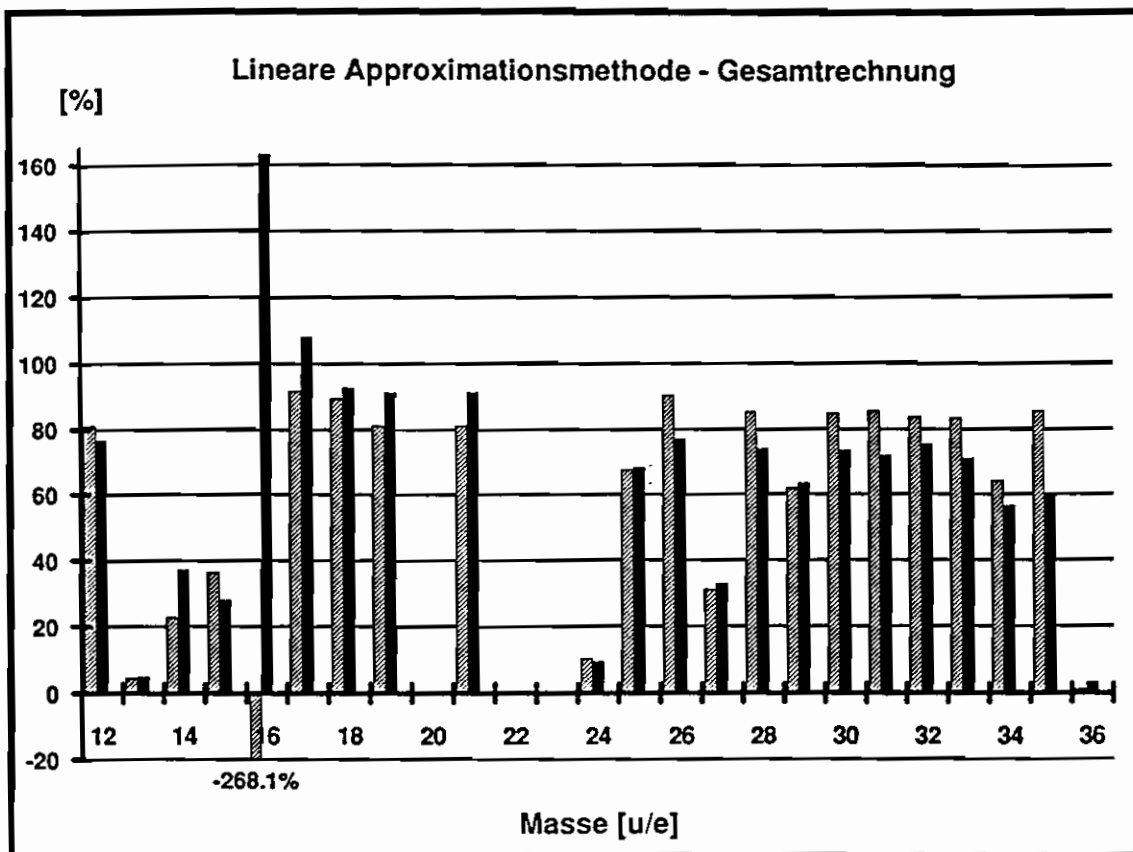
Figur 27a. Die schwarz eingezeichneten Balken zeigen die mit dem Gesamtmodell gerechneten Ionen der  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ -Standardkoma nach Kapitel 4.2, wobei  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.0175$  angenommen wurde. Wenn die gerechneten Balken die Messdaten überschreiten, erscheinen sie in der Darstellung schraffiert. Die Masse 21 u/e entsteht durch das Isotopion  $\text{H}_3^{18}\text{O}^+$ . Angenommen wurde ein terrestrisches  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhältnis von 0.00205. Der Beitrag zum Massenkanal der Masse 20 u/e ( $\text{DH}_2^{16}\text{O}^+ + \text{H}_2^{18}\text{O}^+ + \text{H}_3^{17}\text{O}^+$ ) hängt vom D/H-Verhältnis ab und ist in dieser Arbeit bewusst offen gelassen worden.

Figur 27b. (Figur auf der nächsten Seite) Willkürliches, nach der im Text beschriebenen linearen Approximationsmethode aufgefülltes Ionenspektrum. Die verschiedenen Schraffuren zeigen die Ionenbeiträge durch die Muttermoleküle  $A_i$ . In der Legende sind die zugehörigen Moleküle aufgeführt. Das Massenspektrum der Standardkoma erscheint wiederum schwarz. Aus Gründen der Übersicht werden die negativen Beiträge im Standardspektrum bereits abgezogen. Nicht dargestellt ist der negative Beitrag von -260% auf der Masse 16 u/e. Die in der Figur gewählte Molekülzusammensetzung dient nur als Demonstrationsbeispiel und zeigt nicht die gesuchte, d.h. gemessene radiale Abhängigkeit. Entgegen der Beschreibung im Text wurde ein möglichst gleichmäßiges Auffüllen der Massenlinien aller Massen angestrebt. Damit die Wassergruppe (Massen 17 u/e - 21 u/e) nicht übermäßig abgebaut wird, wurden die Massenlinie nur bis zu 80% aufgefüllt. Die gewählten Häufigkeiten  $Q(A_i)/Q(\text{H}_2\text{O})$  der einzelne Moleküle lauten: 2.19%  $\text{H}_2\text{CO}$ , 0.55%  $\text{CH}_3\text{OH}$ , 0.24%  $\text{H}_2\text{S}$ , 3.33%  $\text{CH}_4$ , 3.50%  $\text{CO}_2$ , 4.00%  $\text{CO}$ , 0.66%  $\text{C}_2\text{H}_2$ , 0.47%  $\text{C}_2\text{H}_4$ , 0.81%  $\text{C}_2\text{H}_6$ , 0.90%  $\text{CS}_2$ , 0.50%  $\text{C}$ , 0.02%  $\text{C}_2$ , 0.50%  $\text{CH}_3\text{NH}_2$  und 0.04%  $\text{NO}$ .

# Lineare Approximationsmethode







Figur 27c. Schraffiert dargestellt noch einmal das durch die lineare Approximation erhaltene Spektrum aus b). Die schwarzen Balken daneben zeigen das Ionenspektrum, wenn mit der gleichen Molekülzusammensetzung die Gesamtrechnung ohne Näherung durchgeführt wird.

Spektren anders nicht erklärt werden können. Die Kunst liegt darin, Massenlinien zu finden, die sich idealerweise nur durch *ein* Muttermolekül aus einer Kernquelle erklären lassen. Solche Linien können sofort aufgefüllt werden. Zudem zeigt die radiale Abhängigkeit, ob die getroffene Wahl richtig war. Auf diese Art und Weise kann schliesslich sukzessive das Spektrum aufgebaut werden. Kapitel 4.3 bis 4.9 zeigen, wie am Beispiel der NMS-Ionenspektren dieses Prinzip angewandt werden kann.

- (4) Nach Punkt (3) sind zur Standardkoma neue Moleküle  $A_i$  dazugestossen. Die Schnelligkeit der unter (3) beschriebenen linearisierten Methode haben wir mit einer Vereinfachung erkaufte; denn die neu ermittelte Zusammensetzung basiert auf der Voraussetzung, dass die Beiträge der neuen Spezies additiv sind und sich gegenseitig nicht beeinflussen. Indem nun mit der neuen, erweiterten Molekülzusammensetzung als Anfangsbedingung die vollständige Modellrechnung ausgeführt wird, lassen sich mögliche Abweichungen zum linearisierten Modell feststellen und korrigieren. Die neu identifizierten Moleküle zusammen mit den bereits bekannten schaffen die Grundlage für eine neue, erweiterte Standardkoma. Mit dieser kann nun wieder nach Punkt (1) weitergearbeitet werden.

Ausgegangen wird von einer  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ -Standardkoma. Mit dieser können ca. 2/3 aller gemessenen Ionen erklärt werden. Am Schluss dieser Arbeit wird aus den NMS-Ionenspektren

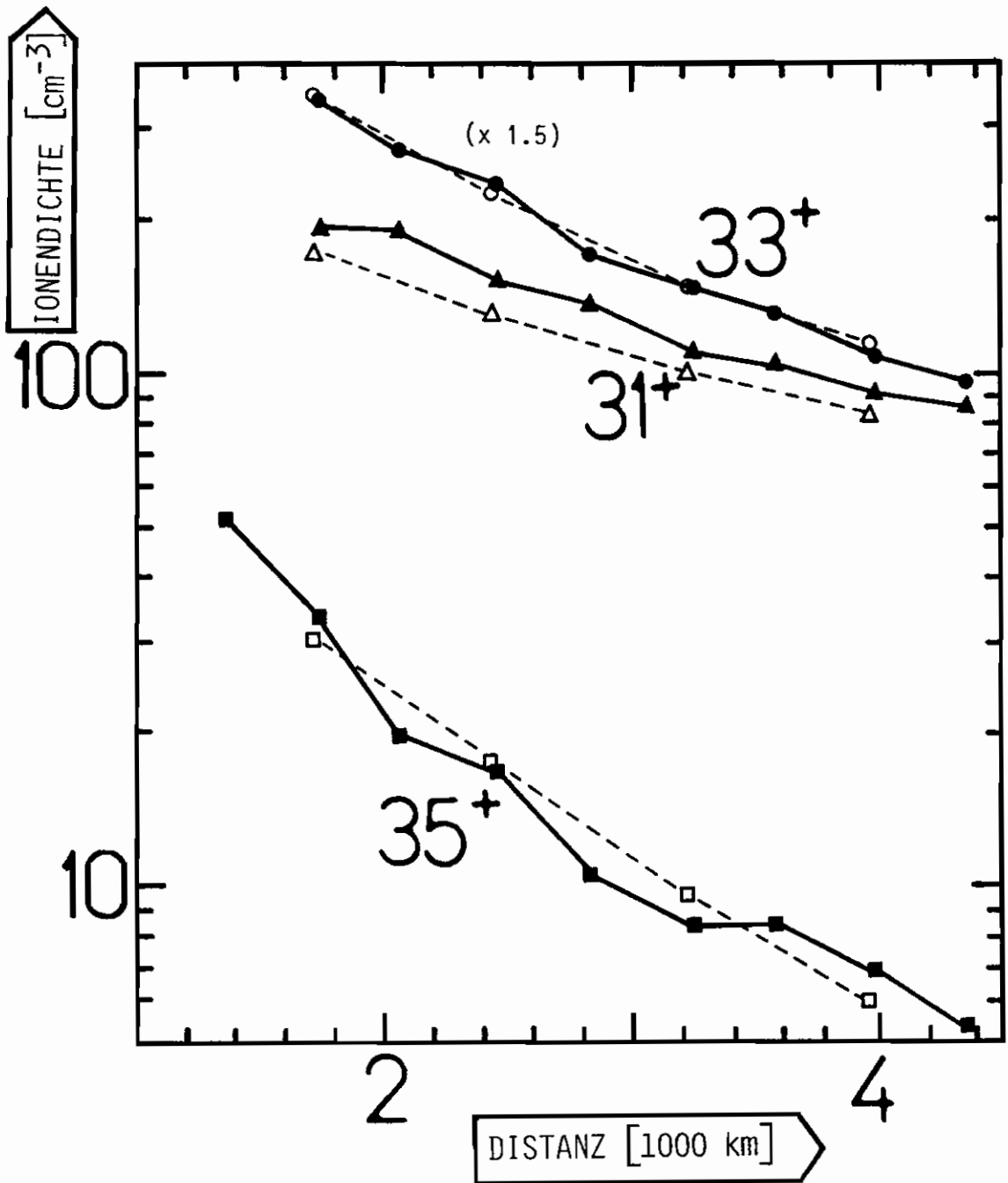
eine "Standardkoma" abgeleitet, bei der auf Grund der NMS-Ionenspektren (und in reduziertem Masse auch basierend auf den Gasspektren) bei  $R = 100$  km die Moleküle  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{CO}]$ ,  $[\text{CO}_2]$ ,  $\text{H}_2\text{CO}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$  und  $\text{H}_2\text{S}$  als Muttermoleküle identifiziert werden können (für die Spezies in eckigen Klammern existiert nur eine obere Schranke). Mit dieser Molekülzusammensetzung können ~80% aller im Massenbereich von 12 u/e bis 36 u/e gemessenen Ionen erklärt werden.

Obschon Figur 27 nur ein willkürlich generiertes Spektrum zeigt, sind doch einige charakteristische Eigenschaften ersichtlich. Die Massen 13 u/e (CH), 14 u/e (N,  $\text{CH}_2$ ) und 15 u/e (NH,  $\text{CH}_3$ ) weisen ein beträchtliches Defizit an Ionen auf. Entweder tragen Bruchstücke von höhermolekularen Ionen ( $M > 40$  u/e) noch zu diesen Massenkanälen bei, oder die schwer zu bestimmenden Reaktionskonstanten der C- und N-haltigen Radikale der Massen 13 u/e - 15 u/e sind zum Teil falsch oder unvollständig.

Bei der Masse 16 u/e versagt die lineare Approximationsmethode. Auf den Massenkanal 16 u/e fallen zu etwa gleichen Teilen  $\text{O}^+$ -,  $\text{NH}_2^+$ - und  $\text{CH}_4^+$ -Ionen. Tendenziell überschätzt die lineare Approximationsmethode den  $\text{NH}_2^+$ -Abbau, wenn weitere Moleküle zur Standardkoma hinzugefügt werden. Andererseits unterschätzt die lineare Approximationsmethode den  $\text{O}^+$ -Zuwachs aus anderen Molekülen als Wasser. Am Beispiel von Methan zeigt sich, dass 1% Methan den falsch eingeschätzten  $\text{NH}_2^+$ -Verlust gegenüber der Standardkoma nicht durch  $\text{CH}_4^+$ -Ionen kompensieren kann. Da in der linearen Approximationsmethode bei den einzelnen Massenlinien *nicht* nach Spezies unterschieden wird, und nur *Differenzen* zur Standardkoma für die weitere Rechnung verwendet werden, wirkt Methan scheinbar abbauend auf  $16^+$ . Bereits 2% Methan hätten aber genügt, den falsch eingeschätzten  $\text{NH}_2^+$ -Abbau mehr als zu kompensieren, womit die Differenz zur Standardkoma positiv ausgefallen wäre. Der Abbau der  $\text{NH}_2^+$ -Ionen erfolgt also nicht proportional zum Zuwachs der  $\text{CH}_4^+$ -Ionen. Die Massenlinie 16 u/e zeigt als einzige dieses nichtlineare Verhalten, da die "1%-Beiträge" auf der Masse 16 u/e vergleichbar viele Ionen beisteuern oder abbauen wie die Standardkoma.

Positiv wirkt sich der Umstand aus, dass die Wassergruppe (17 u/e - 21 u/e) leicht weniger stark abgebaut wird als auf Grund der Approximationsmethode vorausgesagt wird. Die Masse 20 u/e ( $\text{DH}_2^{16}\text{O}^+ + \text{H}_2^{18}\text{O}^+ + \text{H}_3^{17}\text{O}^+$ ) wird bewusst nicht diskutiert, da sie von der genauen Kenntnis des D/H-Verhältnisses abhängig ist, das in dieser Arbeit nicht behandelt wird. Die Massenkanäle 22 und 23 u/e müssen noch eingehender analysiert werden, sind aber im wesentlichen unbesetzt. Bislang ungelöst ist die Frage, welche Ionen die Massen 24 u/e und 27 u/e auffüllen können. Während bei der Masse 24 u/e der  $\text{C}_2^+$ -Beitrag aus  $\text{C}_2$  durch die  $\text{C}_2\text{H}^+$ -Produktion auf der Masse 25 u/e limitiert wird, setzt die  $\text{HCNH}^+$ -Häufigkeit (28 u/e) eine obere Schranke für den  $\text{HCN}^+$ -Beitrag auf der Masse 27 u/e. Ab Masse 30 u/e ergibt die Gesamtrechnung durchwegs kleinere Ionendichten als die lineare Approximationsmethode voraussagt. Daraus begründen sich die Korrekturfaktoren, mit denen die Resultate aus der linearen Approximationsmethode in den Kapiteln 4.4 - 4.7 nachkorrigiert werden.

Wegen den tiefen Iontemperaturen ( $\leq 300$  K) konnte der NMS E-Analysator innerhalb der Kavität die Energiespektren der einzelnen Massen noch trennen. Der E-Analysator operierte also in der inneren Koma ebenfalls als Massenspektrometer. Ein Vergleich der vollständig unabhängig ausgewerteten Daten des E- und M-Analysators ergibt, dass die relativen Verhältnisse der Massenlinien der beiden Instrumente gut bis sehr gut übereinstimmen (Figur 28).



**Figur 28:** Giotto NMS: Ionendichten innerhalb der Kontaktfläche des Kometen P/Halley. Die Datenpunkte des M-Analysators sind mit ausgezogenen Linien und diejenigen des E-Analysators mit unterbrochenen Linien verbunden. Die M-Analysatordaten wurden dabei mit einem Faktor 0.53 multipliziert. Die Ionendichten sind *nicht* auf den molekülabhängigen Detektor-Yield korrigiert.

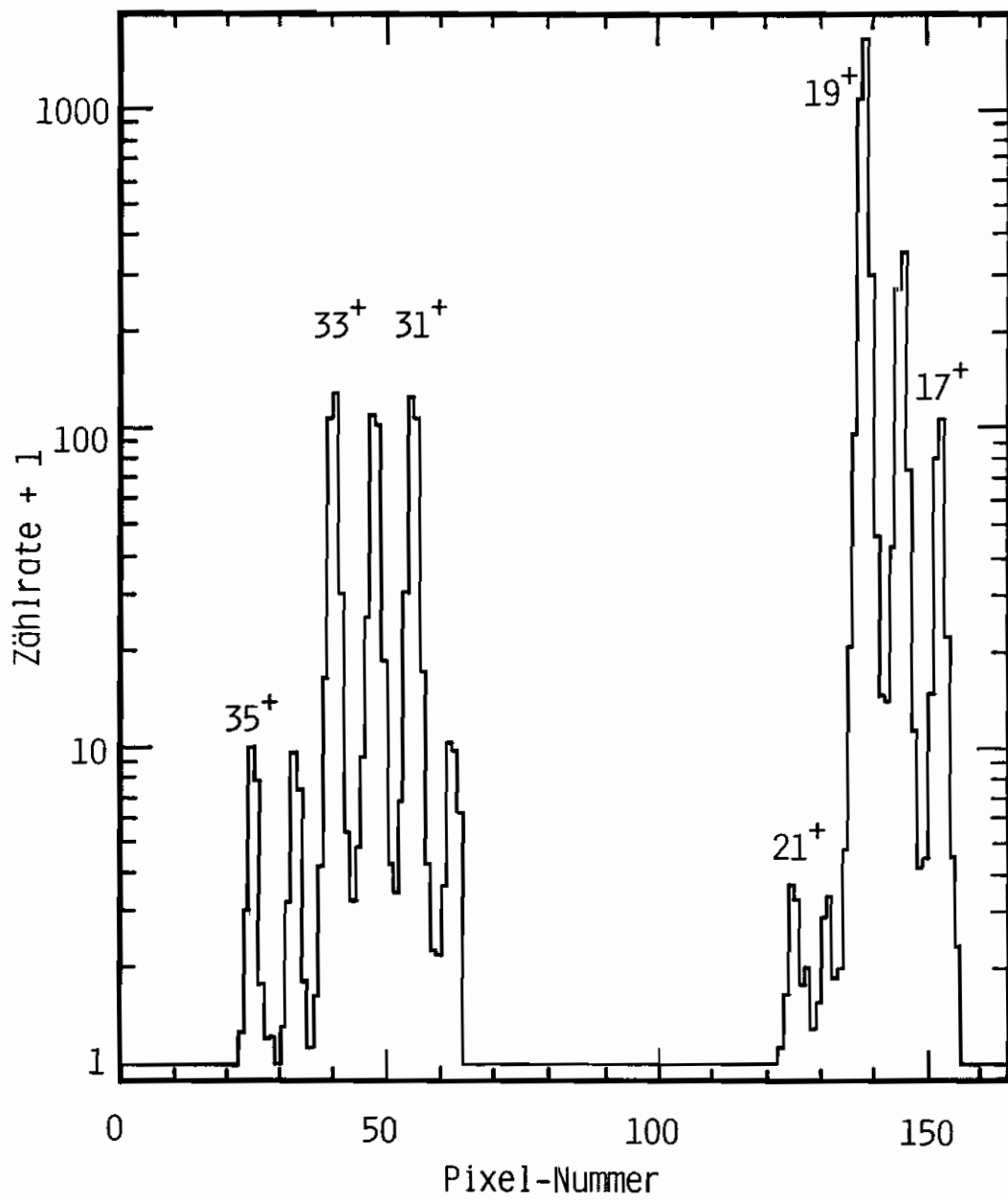
Dagegen ergibt der Vergleich der absoluten Ionendichten eine massive Diskrepanz von einem Faktor  $\sim 2.25$  zwischen den beiden Analysatoren. Die mit dem M-Analysator bestimmten Ionendichten liegen deutlich über denjenigen des E-Analysators. Auch eine intensive Suche nach einem möglichen systematischen Fehler blieb erfolglos. Obwohl die Massenspektren des M-Analysators naturbedingt qualitativ wesentlich besser sind als die Messungen des E-Analysators, können beide Analysatoren gleichermaßen von einem allfälligen systematischen Fehler in der Absolutendichte betroffen sein. Vermutlich hat sich der Gain um einen konstanten Faktor verändert, wobei der Gain der höchsten Verstärkungsstufe davon nicht betroffen ist. Die MCPs werden in dieser Verstärkungsstufe bei Sättigung betrieben, womit der Detektor bezüglich Verstärkungsverhalten stabiler ist. So lässt sich begründen, weshalb die Neutralmessungen, welche fast ausschliesslich in der höchsten Verstärkungsstufe aufgenommen wurden, bei beiden Analysatoren gleiche Absolutdichten ergeben. Aus dem GS/HG-Vergleich gibt es allerdings keine eindeutigen Hinweise, dass sich der Gain der höchsten Verstärkungsstufe speziell verhält. Allerdings sind die Ionenmessungen in der obersten Verstärkungsstufe mit grossen statistischen Fehlern behaftet, und die Instrumententransmission ist wahrscheinlich infolge der hohen Iontemperaturen ebenfalls anders als für kalte Ionen nahe am Kometen. Wir wählten im folgenden als absolute Ionendichte den Mittelwert aus den beiden Instrumenten. Die Ionendichten des M-Analysators müssen also mit dem Faktor  $2/3$  multipliziert werden. Alle in dieser Arbeit angegebenen Ionendichten basieren auf *Messungen des M-Analysators*, wobei *automatisch die Korrektur mit dem Faktor  $2/3$  durchgeführt* wurde. Unser Komamodell zeigt, dass die gewählte absolute Ionendichte gut mit den gerechneten Ionendichten übereinstimmt.

## 4.2 Wasser (H<sub>2</sub>O) und Ammoniak (NH<sub>3</sub>) im Kometen P/Halley

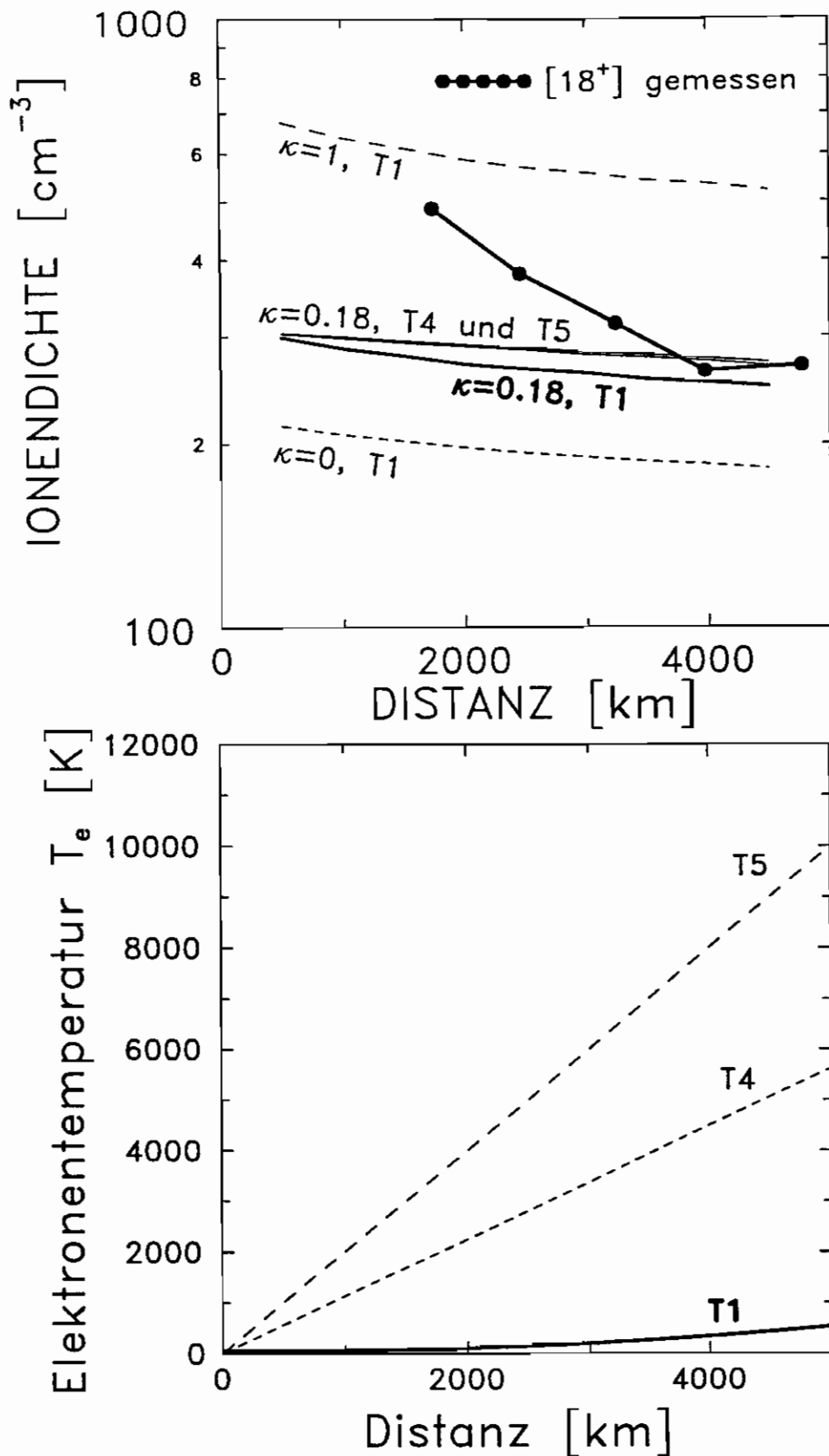
In der inneren Koma sind Ionen, welche über Photoionisation aus Wasser gebildet werden, dominant (Figur 29: Massen 17 u/e - 21 u/e). Bedeutende Ionenbeiträge kommen unter anderem aber auch von Ionen der Massen 31 u/e bis 33 u/e, auf die in den folgenden Kapiteln eingegangen werden soll. Im vorliegenden Abschnitt wird anhand verschiedener Komaskimulationen und den Messungen des M-Analysators dargelegt, dass der Kometenkern eine nicht vernachlässigbare Ammoniakquelle besitzen muss.

Protonierte Wasserionen H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> erzeugen das Hauptsignal mit der Masse 19 u/e. NH<sub>4</sub><sup>+</sup> und H<sub>2</sub>O<sup>+</sup> bestimmen die Masselinie 18 u/e. In der Masselinie 17 u/e teilen sich die Ionen OH<sup>+</sup> und NH<sub>3</sub><sup>+</sup>. Komaskimulationen zeigen überdies, dass CH<sub>5</sub><sup>+</sup> selbst unter extremen Annahmen nur vernachlässigbare Beiträge zur Masselinie 17 u/e leistet. Die Masselinie 16 u/e wird durch O<sup>+</sup>- und NH<sub>2</sub><sup>+</sup>-Ionen belegt. Da die Signalstärke im Massenbereich 16 u/e - 19 u/e mit steigender Masse zunimmt, sind Beiträge durch Moleküle mit eingebauten schweren Isotopen, wie D, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N oder <sup>18</sup>O vernachlässigbar. Demgegenüber lassen sich die um 2 bis 3 Grössenordnungen kleineren Signale bei 20 u/e und 21 u/e nur mit selteneren Isotopionen wie H<sub>2</sub><sup>18</sup>O<sup>+</sup>, H<sub>3</sub><sup>17</sup>O<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>D<sup>16</sup>O<sup>+</sup> und H<sub>3</sub><sup>18</sup>O<sup>+</sup> erklären [Eberhardt et al., 1987a].

Die NMS-Neutralmessungen legen die H<sub>2</sub>O-Kernproduktionsrate nach Kapitel 3.4 fest. Es gelingt aber nicht, auf der Masse 18 u/e den beobachteten Anstieg der Ionendichte mit kleiner werdendem Abstand zum Kometenkern durch ein Modell mit einer reinen Wasseratmosphäre zu erzeugen (Figur 30). An dieser Feststellung können auch massive Änderungen an der



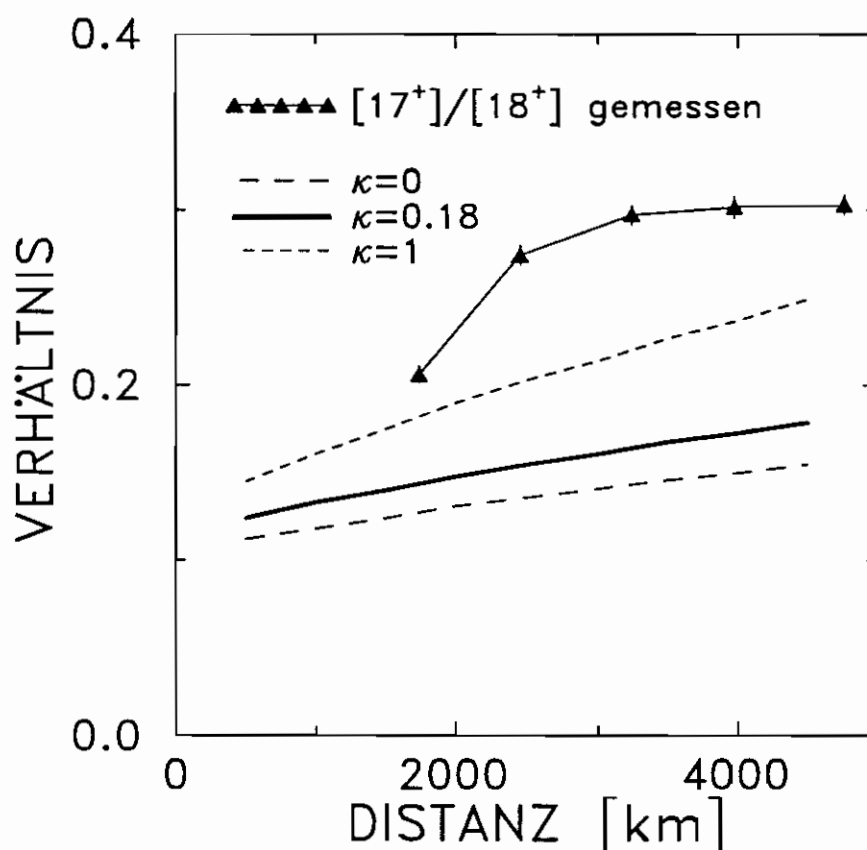
**Figur 29:** Giotto NMS: Ionenspektrum des M-Ansalyators, aufgenommen bei einer Distanz von 3240 km zum Kometenkern von P/Halley. Die Figur zeigt nur die Massenslinien von 17 - 21 u/e sowie die Massenslinien von 30 - 35 u/e.



**Figur 30:** Vergleich zwischen der gemessenen Ionendichte auf der Masse 18 u/e (Kreise) und der modellierten  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Ionendichten einer reinen Wasseratmosphäre für verschiedene Elektronentemperaturen und verschiedene Sonnenaktivitäten. Die Messpunkte sind Daten des NMS M-Analysators, analog mit dem Detektor-Yield korrigiert wie in Figur 33. Die dick ausgezogene Kurve zeigt die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Ionendichte bei der aus dem neutralen NMS-Wasserprofil abgeleiteten Sonnenaktivität und der in dieser Arbeit verwendeten Elektronentemperatur (T1). Die untere Figur zeigt die verschiedenen Elektronentemperaturen.

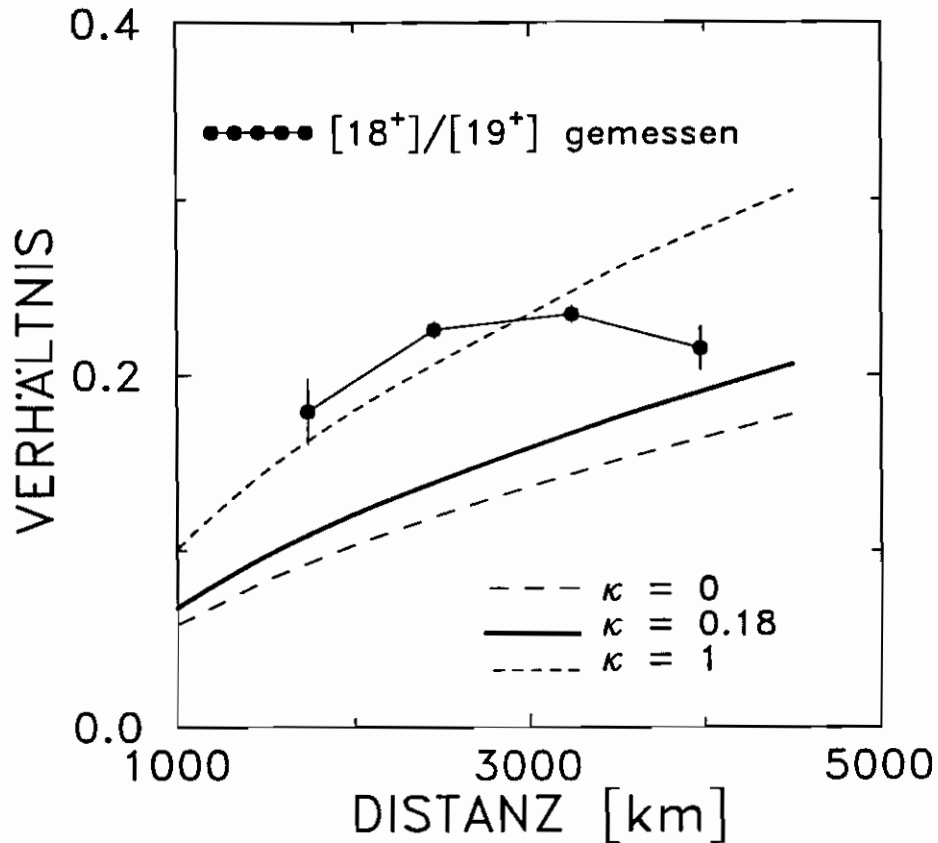
Elektronentemperatur nichts bewirken: In Figur 30 wurden neben der in dieser Arbeit verwendeten Elektronentemperatur T1 auch zwei weitere, willkürlich festgelegte Temperaturprofile T4 und T5 untersucht. Die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Teilchendichte scheint äusserst schwach auf die Elektronentemperatur zu reagieren. Dies hängt damit zusammen, dass einerseits  $\text{H}_2\text{O}^+$  fast vollständig über Photodissoziation aus Wasser produziert wird, und andererseits die Reaktion  $\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}$  zu beinahe 100% für den  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Abbau verantwortlich ist. Die von der Elektronentemperatur abhängige Elektronenrekombination spielt demzufolge für die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Chemie keine Rolle. Durch die Variation der Sonnenaktivität  $\kappa$  wird zwar die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Häufigkeit vergrössert respektive verkleinert. Die radiale Abhängigkeit der  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Häufigkeit ändert aber dabei, abgesehen von einem Skalierungsfaktor, nicht.

Sowohl die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Produktionsrate (Photoionisation von  $\text{H}_2\text{O}$ ) wie auch die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Destruktionsrate (Ladungsaustausch mit  $\text{H}_2\text{O}$ ) sind in guter Näherung proportional zur neutralen Wasserdichte. Für den  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Gleichgewichtszustand bedeutet dies, dass die  $\text{H}_2\text{O}^+$ -Häufigkeit in erster Ordnung *unabhängig* von der neutralen Wasserdichte ist. Daraus folgt, dass der beobachtete  $18^+$ -Dichteanstieg für Distanzen unterhalb 4000 km nicht mit einem Wasserjet erklärt werden kann.



Figur 31: Das gerechnete  $[17^+]/[18^+]$ -Verhältnis einer reinen Wasseratmosphäre bei verschiedenen Sonnenaktivitäten im Vergleich mit den Messungen.

Figuren 31 und 32 vergleichen das gemessene  $[17^+]/[18^+]$ - und  $[18^+]/[19^+]$ -Verhältnis mit den modellierten Ionendichten einer reinen Wasseratmosphäre bei verschiedenen Sonnenaktivitäten. Selbst bei maximaler Sonnenaktivität wird das modellierte  $[17^+]/[18^+]$ -Verhältnis ohne Zuhilfenahme von Ammoniak zu klein. Ausserdem widerspricht die Annahme, dass die Sonne während der Giotto-Mission maximal aktiv war, allen Beobachtungen.



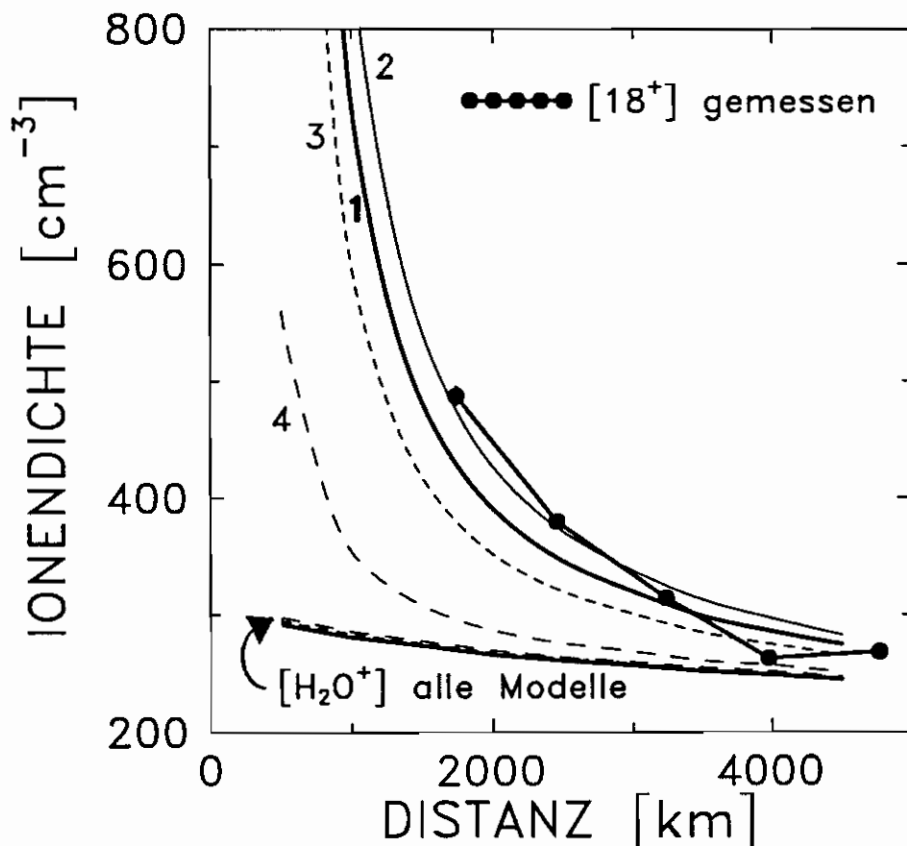
Figur 32: Das gerechnete  $[18^+]/[19^+]$ -Verhältnis einer reinen Wasseratmosphäre bei verschiedenen Sonnenaktivitäten im Vergleich mit den Messungen.

Alle bisherigen Überlegungen führen zum immer gleichen Schluss: Wasser alleine kann die beobachteten Signale in den Ionenspektren auf den Massen 17 u/e und 18 u/e nicht ausreichend erklären.

Erst eine relative  $\text{NH}_3$ -Kernproduktionsrate  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) \approx 1.5\% \pm 0.5$  vermag die  $17^+$ -,  $18^+$ - und  $19^+$ -Dichteradialprofile wie auch die entsprechenden Verhältnisse befriedigend zu reproduzieren (Figuren 33-37): Aus der  $18^+$ -Häufigkeit folgt (Figur 33) ein Verhältnis  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) \approx 2\%$ , bei einer unteren Grenze von  $\sim 1.5\%$ . Sowohl aus dem  $17^+$ -Dichteprofil (Figur 34) wie auch aus dem  $[18^+]/[19^+]$ -Verhältnis (Figur 37) schliesst man ein Verhältnis  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) \approx 1.5\% \pm 0.5$ . Aus Figur 35, schliesslich, resultiert ein  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Verhältnis zwischen 1% bis 1.5%.



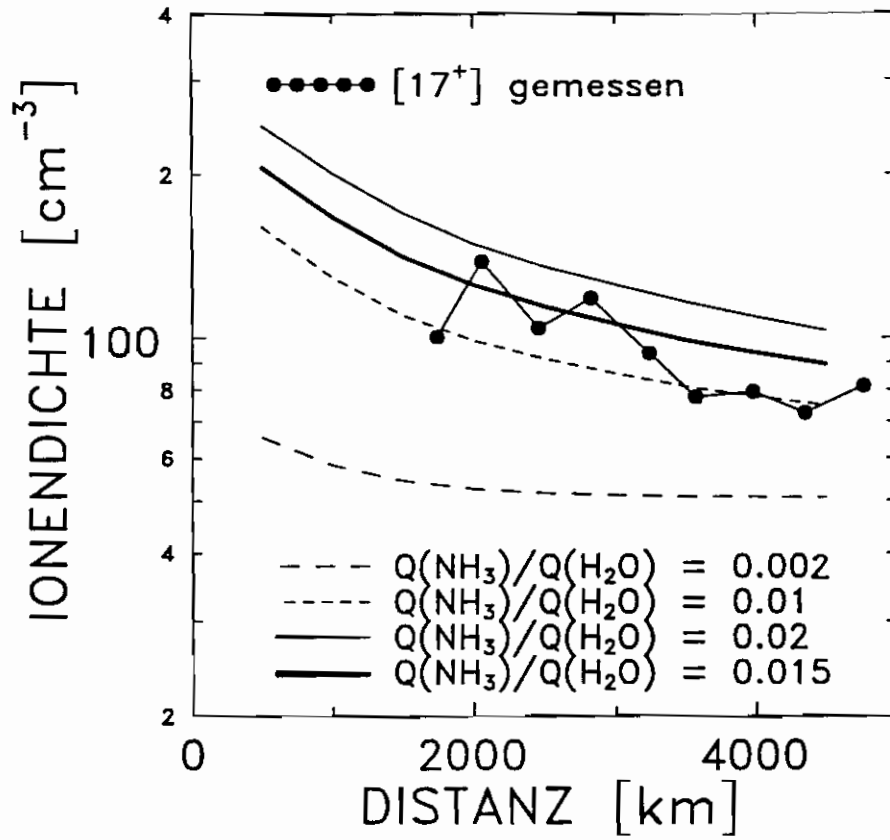
Andere  $\text{NH}_3^+$ - und  $\text{NH}_4^+$ -Produzenten als Ammoniak sind ziemlich sicher ausgeschlossen. So fallen beispielsweise  $\text{NH}_2$ -Radikale, welche durch Fragmentierungsprozesse aus komplexeren Molekülen entstehen, auf Grund von Komaskimulationen als wichtige Quelle von  $\text{NH}_3^+$ - und  $\text{NH}_4^+$ -Ionen ausser Betracht.



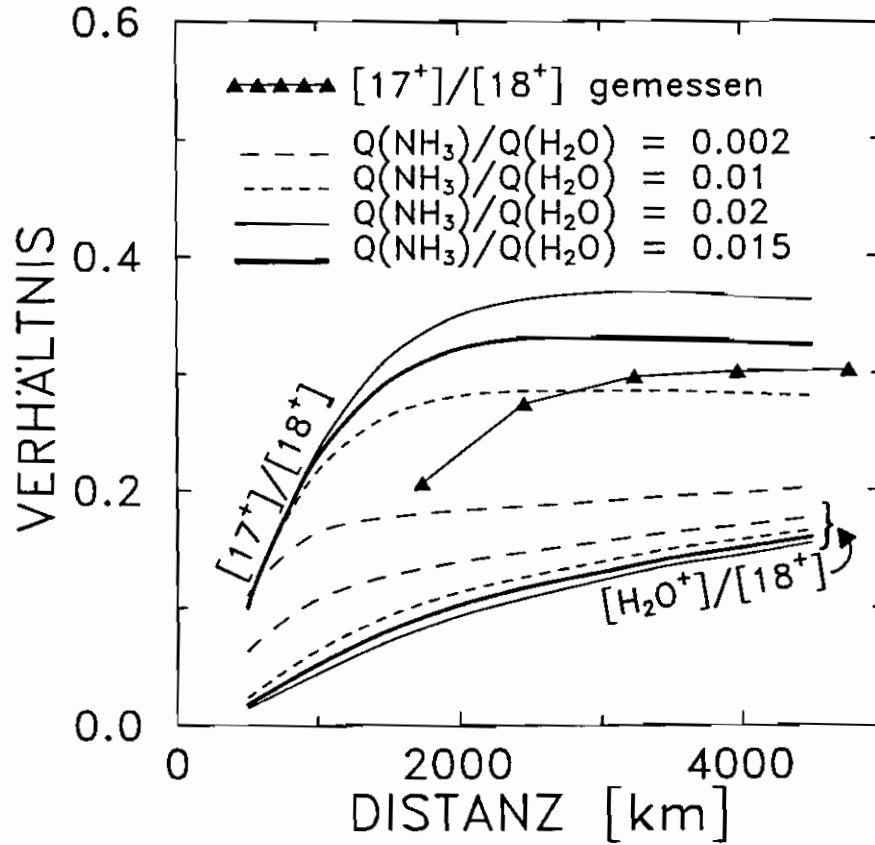
**Figur 33:** Gerechnete  $18^+$ -Ionendichte im Vergleich mit den entsprechenden Ionenmessungen des M-Analysators bei verschiedenen  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Kernproduktionsraten-Verhältnissen. Annahmen: 1:  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.015$ ; 2:  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.02$ ; 3:  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.01$  und 4:  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.002$ . Die Messdaten sind mit einem radial abhängigen Detektor-Yield korrigiert worden (basierend auf Annahme 1).

**Figur 34:** (Figur auf der gegenüberliegenden Seite) Gerechnete  $17^+$ -Ionendichte im Vergleich mit den entsprechenden Ionenmessungen des M-Analysators bei verschiedenen  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Verhältnissen. Analog zu Figur 33 sind die Detektor-Yields in den Messdaten berücksichtigt worden.

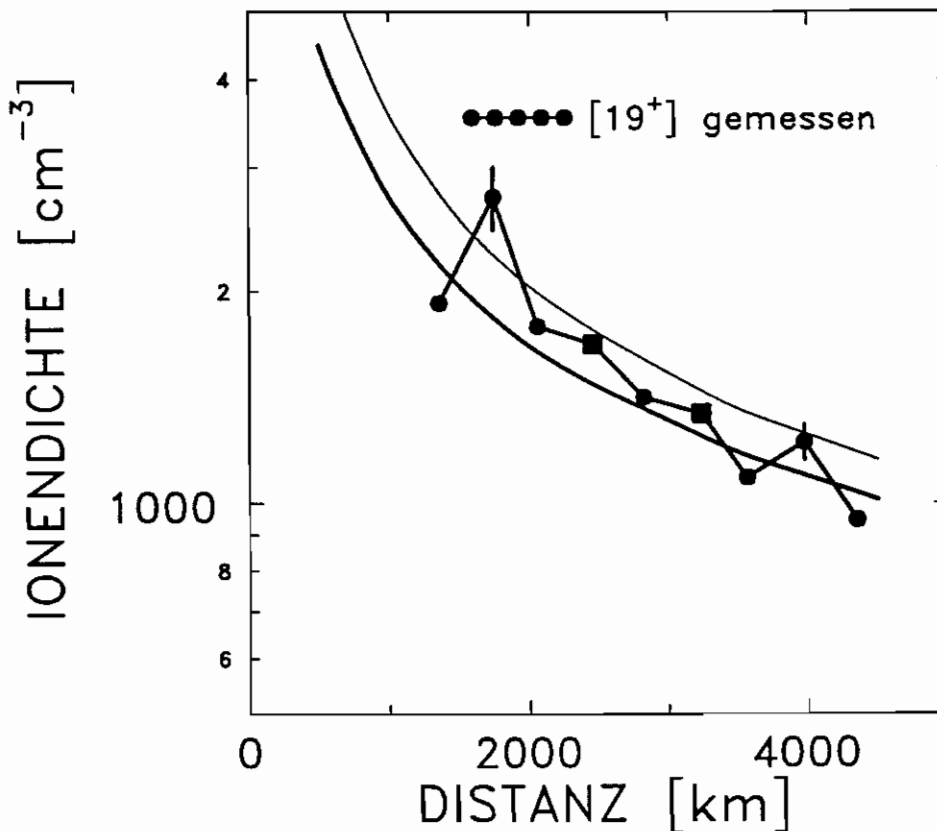
**Figur 35:** (Figur auf der gegenüberliegenden Seite)  $[17^+]/[18^+]$ -Verhältnis in Messung (Punkte) mit dem NMS M-Analysator und Rechnung bei verschiedenen  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Verhältnissen. Gezeigt werden einerseits das Verhältnis  $[17^+]/[18^+]$  und andererseits das Verhältnis  $[\text{H}_2\text{O}^+]/[18^+]$ . Analog zu Figur 33 sind die Detektor-Yields in den Messdaten berücksichtigt worden. Der Messpunkt bei  $R = 1740$  km wird durch das Modell nicht befriedigend wiedergegeben. Ansonsten folgt ein  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$  zwischen 1% bis 1.5%.



(Figur 34)



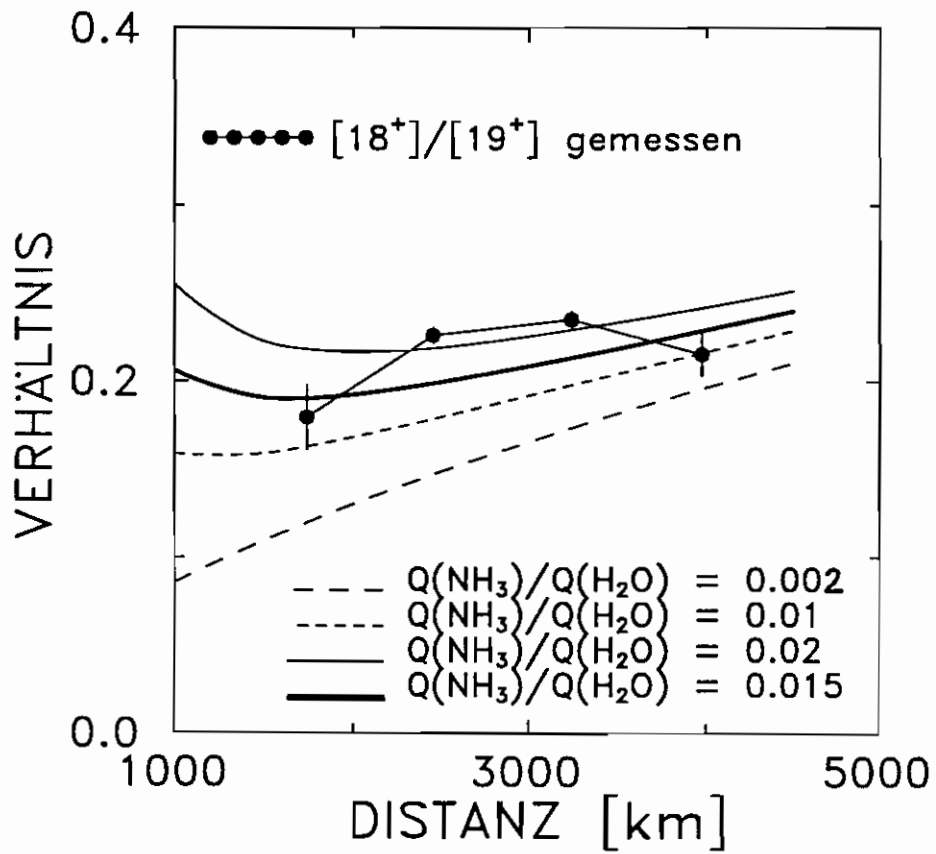
(Figur 35)



**Figur 36:** Mit dem NMS M-Analysator gemessene  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionendichte im Vergleich mit den modellierten Werten. Quadrate bezeichnen Messpunkte des NMS-Massenanalysators auf der Masse 19 u/e. Die Kreise sind Messpunkte, die auf Grund der Masse 21 u/e unter Annahme eines terrestrischen  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhältnisses von 0.00205 bestimmt wurden. Die dünne Kurve zeigt die modellierte  $[19^+]$ -Kurve einer reinen  $\text{H}_2\text{O-NH}_3$ -Koma ( $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.015$ ,  $\kappa = 0.18$ ). Die dicke Kurve stammt aus der Gesamtrechnung nach Kapitel 4.9.

Als Kontrolle vergleicht Figur 36 das gemessene mit dem gerechneten  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Profil. Durch das Beifügen weiterer Muttermoleküle wird die gerechnete, totale Ionendichte und damit auch die totale Elektronendichte noch ansteigen. Durch die erhöhte Elektronendichte wird ebenfalls der Abbau von  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Ionen durch Elektronenrekombination höher sein als in einer reinen  $\text{H}_2\text{O-NH}_3$ -Koma. In Figur 36 ist deshalb die  $\text{H}_3\text{O}^+$ -Dichte eingetragen, welche sich ergibt, wenn alle Moleküle nach Kapitel 4.9 im Modell berücksichtigt werden.

Im Simulationsprogramm ist eine Prozedur integriert, die es uns ermöglicht, die relative Wichtigkeit der einzelnen Reaktionen zu erfassen. Die wichtigsten Reaktionen der  $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$ -Chemie sind in Tabelle 11 zusammengefasst.



**Figur 37:** Das gemessene [18<sup>+</sup>]/[19<sup>+</sup>]-Verhältnis im Vergleich mit dem H<sub>2</sub>O-NH<sub>3</sub>-Modell bei verschiedenen Verhältnissen von  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O})$ . Die Messwerte sind bezüglich Detektor-Yield individuell korrigiert worden.

**Tabelle 11:** Die wichtigsten NH<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O-Reaktionen in der Übersicht.

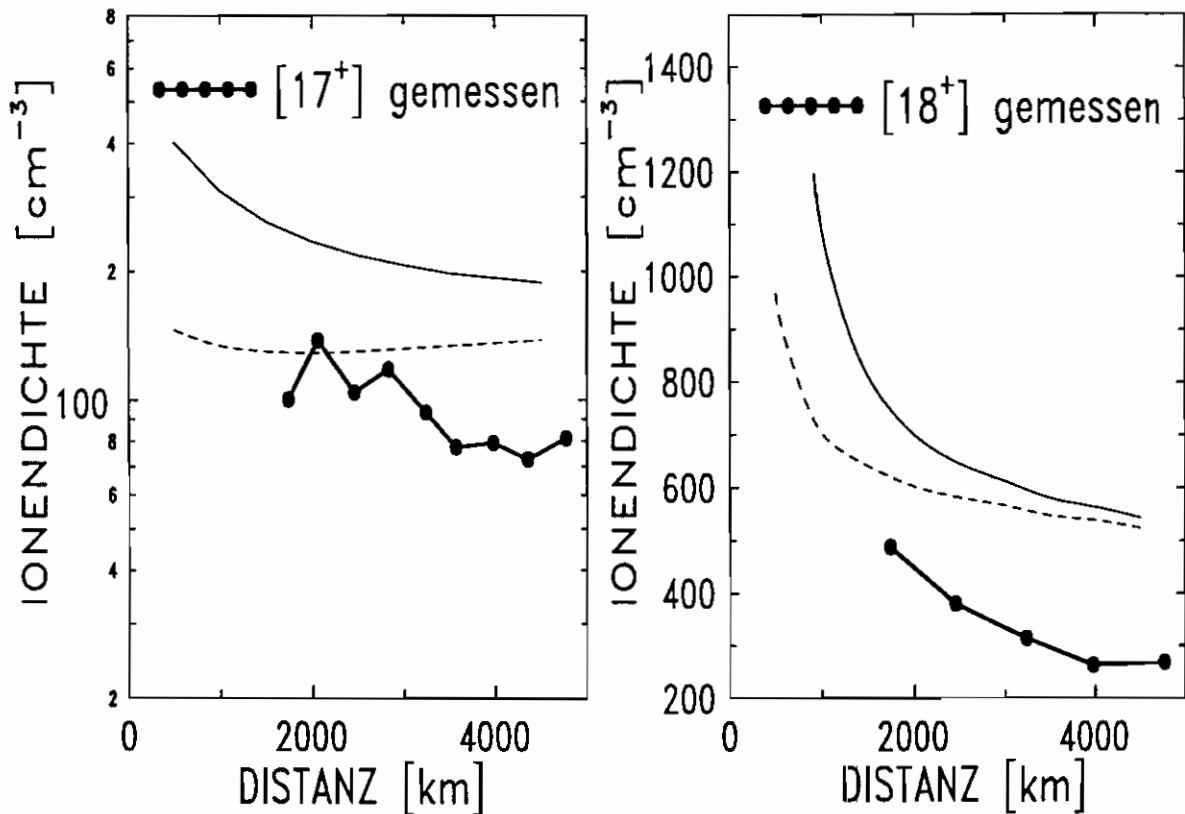
Reaktion	Reaktionskonstante k <sub>i</sub> [s <sup>-1</sup> ]		Literaturquelle
	Sonnenaktivitäts- minimum	Sonnenaktivitäts- maximum	
<i>Photoreaktionen:</i>			
H <sub>2</sub> O + hv → OH + H	1.00·10 <sup>-5</sup>	1.90·10 <sup>-5</sup>	<i>Huebner et al. [1989]</i>
H <sub>2</sub> O + hv → H <sub>2</sub> + O( <sup>1</sup> D)	1.40·10 <sup>-6</sup>	3.80·10 <sup>-6</sup>	"
H <sub>2</sub> O + hv → H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	3.30·10 <sup>-7</sup>	1.00·10 <sup>-6</sup>	"
H <sub>2</sub> O + hv → OH <sup>+</sup> + H + e <sup>-</sup>	5.50·10 <sup>-8</sup>	2.20·10 <sup>-7</sup>	"
H <sub>2</sub> O + hv → O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	5.80·10 <sup>-9</sup>	3.80·10 <sup>-8</sup>	"
H <sub>2</sub> O + hv → H <sup>+</sup> + OH + e <sup>-</sup>	1.30·10 <sup>-8</sup>	6.50·10 <sup>-8</sup>	"
OH + hv → O + H	1.20·10 <sup>-5</sup>	1.40·10 <sup>-5</sup>	"
OH + hv → O( <sup>1</sup> D) + H	7.00·10 <sup>-6</sup>	2.00·10 <sup>-5</sup>	"
OH + hv → O( <sup>1</sup> S) + H	8.30·10 <sup>-7</sup>	2.40·10 <sup>-6</sup>	"
OH + hv → OH <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	2.40·10 <sup>-7</sup>	9.00·10 <sup>-7</sup>	"
O + hv → O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	2.10·10 <sup>-7</sup>	8.50·10 <sup>-7</sup>	"
O( <sup>1</sup> D) + hv → O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	1.80·10 <sup>-7</sup>	7.40·10 <sup>-7</sup>	"
O( <sup>1</sup> S) + hv → O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	2.00·10 <sup>-7</sup>	7.50·10 <sup>-7</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>2</sub> + H	1.70·10 <sup>-4</sup>	1.70·10 <sup>-4</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH + H <sub>2</sub>	4.00·10 <sup>-6</sup>	5.50·10 <sup>-6</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH + H + H	2.00·10 <sup>-6</sup>	5.40·10 <sup>-6</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	6.10·10 <sup>-7</sup>	1.60·10 <sup>-6</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H + e <sup>-</sup>	1.80·10 <sup>-7</sup>	5.20·10 <sup>-7</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	6.90·10 <sup>-9</sup>	3.20·10 <sup>-8</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → N <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	3.30·10 <sup>-9</sup>	1.90·10 <sup>-8</sup>	"
NH <sub>3</sub> + hv → H <sup>+</sup> + NH <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	3.30·10 <sup>-9</sup>	2.00·10 <sup>-8</sup>	"
NH <sub>2</sub> + hv → NH + H	2.10·10 <sup>-6</sup>	3.70·10 <sup>-6</sup>	"
<hr/>			
Reaktion	Reaktionskonstante k <sub>i</sub> [cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		Literaturquelle
<i>Elektronenrekombination:</i>			
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub> O + H	2.34·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		<i>Schmidt et al. [1988]</i>
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → OH + H <sub>2</sub>	2.33·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → OH + H + H	2.33·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → OH + H	5.32·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → O + H <sub>2</sub>	1.52·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub> + O( <sup>1</sup> D)	7.60·10 <sup>-8</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
OH <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → O + H	8.22·10 <sup>-8</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH <sub>3</sub> + H	1.17·10 <sup>-6</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH <sub>2</sub> + H + H	1.30·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH <sub>2</sub> + H	1.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH + H <sub>2</sub>	1.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH + H + H	1.90·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → N + H + H	1.50·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		<i>Millar et al. [1991]</i>
NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → NH + H	1.50·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"

(Fortsetzung Tabelle 11)

Reaktion	Reaktionskonstante $k_i$ [ $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ ]	Literaturquelle
<i>Weitere Reaktionen:</i>		
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{O}$	$2.20 \cdot 10^{-9}$	<i>Millar et al.</i> [1991]
$\text{H}_3\text{O}^+ + \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$	$9.70 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}$	$2.10 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}_2\text{O}$	$2.21 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{OH}$	$9.45 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{H}_2\text{O}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{O}$	$6.90 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{OH}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{OH}$	$1.59 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{OH}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{O}$	$1.30 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{OH}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{O}$	$1.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{OH}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{OH}$	$1.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{O}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{O}^+ + \text{O}$	$3.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{O}^+ + \text{NH}_3^+ \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{O}$	$1.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{O}^+ + \text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{O}$	$6.80 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{NH}_3^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{OH}$	$1.10 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{NH}_3^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{NH}_2$	$2.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{NH}_2^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{NH}$	$2.76 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{NH}_2^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{O}$	$1.45 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{NH}_2^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{OH}$	$1.00 \cdot 10^{-10}$	"
Insgesamt verwendete Anzahl Reaktionen:	470	

Die Diskussion in der Literatur zur Ammoniakhäufigkeit im Kometen P/Halley ist kontrovers. *Allen et al.* [1987] kamen auf Grund der Giotto IMS (*Ion Mass Spectrometer*) *in situ* Messungen auf eine mit dem hier bestimmten Verhältnis  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 1.5\%$  vergleichbare  $\text{NH}_3$ -Kernproduktionsrate. Sie schätzten den  $\text{NH}_3$ -Anteil relativ zur Kernproduktionsrate von Wasser auf 1% - 2%. *Marconi und Mendis* [1988] ziehen die von *Allen et al.* bestimmten  $\text{NH}_3$ -Werte in Zweifel. Sie führen insbesondere an, dass sich der für die Ionisationsreaktionen zuständige hochenergetische UV-Anteil im Sonnenspektrum ( $\lambda \leq 984\text{\AA}$ ) selbst bei einem Sonnenaktivitätsminimum nicht notwendigerweise auch im Sonnenaktivitätsminimum befinden muss. *Marconi und Mendis* kritisieren ausserdem berechtigterweise die durch *Allen et al.* konstant gewählte Elektronentemperatur, die zu falschen Elektronenrekombinationsraten führt. Indem *Marconi und Mendis* in ihrem Modell für den Photoionisationskanal von  $\text{H}_2\text{O}$  ( $\lambda \leq 984\text{\AA}$ ) eine zwei bis zehnfach höhere Photonenzahl postulieren, zeigen sie auf Grund des  $[18^+]/[19^+]$ -Verhältnisses, dass die IMS-Daten auch mit einer wesentlich kleineren  $\text{NH}_3$ -Kernproduktionsrate erklärt werden können. Sie sind der Ansicht, dass selbst die völlige Absenz von  $\text{NH}_3$  noch mit den Messungen verträglich wäre. *Marconi und Mendis* verschweigen aber, dass sich ihr gerechnetes  $[17^+]/[18^+]$ -Verhältnis nicht mit den IMS-Messungen deckt, wenn man eine  $\text{NH}_3$ -Kernproduktionsrate von wenigen Promillen relativ zu Wasser voraussetzt. Diese Abweichung zu den Messungen kann auch nicht mit einer hohen Sonnenaktivität behoben werden. Da in unserer Reaktionstabelle die  $\text{NH}_3$ - und  $\text{H}_2\text{O}$ -Reaktionskonstanten sowohl für das Sonnenaktivitätsminimum wie auch für das Sonnenaktivitätsmaximum vorhanden sind, wurden neben der standardmässig in dieser Arbeit verwendeten Sonnenaktivität (Aktivitätszahl  $\kappa = 0.18$ ) auch Modellrechnungen bei maximaler Sonnenaktivität untersucht. Figur 38 fasst

die Resultate zusammen.



Figur 38:  $[17^+]$  und  $[18^+]$  bei maximaler Sonnenaktivität: Mit fetten Kreisen sind die Messpunkte dargestellt. Die ausgezogenen Kurven zeigt die Resultate bei maximaler Sonnenaktivität und unverändertem  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.015$ . Die strichlinierte Kurve stellt die Modellrechnung bei einem Sonnenaktivitätsmaximum und einem Verhältnis von  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.002$  vor.

In Tabelle 12 sind die wichtigsten  $\text{NH}_3$ -Reaktionen verschiedener Autorengruppen zusammengefasst. Die in dieser Arbeit verwendeten Konstanten sind auf  $\kappa = 0.18$  umgerechnet worden. Im allgemeinen sind die Unterschiede in den von den verschiedenen Autoren verwendeten Reaktionskonstanten klein. Eine Ausnahme bildet die  $\text{NH}_3^+$ -Elektronenrekombinationskonstante. Der hier adaptierte Wert für die Elektronenrekombination ist vergleichsweise tief, womit wir eher mehr  $\text{NH}_3^+$ -Ionen erhalten als *Allen et al.* [1987] oder *Marconi und Mendis* [1988]. Die  $\text{NH}_3$ -Dissoziation von *Marconi und Mendis* [1988] unterscheidet sich von unserer nur in Bezug auf die Aufteilung in die Dissoziationskanäle  $\text{NH}_2 + \text{H}$  und  $\text{NH} + \text{H}_2$ .

Möchte man als  $\text{NH}_3$ -Kernproduktionsrate  $Q(\text{NH}_3)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.002$  vorgeben, so müsste beispielsweise die Reaktionskonstante  $k$  [ $\text{s}^{-1}$ ] der Reaktion  $\text{NH}_3 + h\nu \rightarrow \text{NH}_3^+ + e^-$  rund  $20\times$  grösser sein als in der Literatur angegeben wird. Auf diese Art und Weise erreicht man zwar ein korrektes  $[17^+]/[18^+]$ -Verhältnis, gerät aber gleichzeitig in Schwierigkeiten bei der Modellierung der Masse 18 u/e.

**Tabelle 12:** Die wichtigsten NH<sub>3</sub>-Reaktionen im Vergleich. Die in dieser Arbeit verwendeten Reaktionskonstanten sind auf κ = 0.18 umgerechnet worden (siehe auch Tabelle 11).

Reaktionsgleichung	Diese Arbeit k [s <sup>-1</sup> , cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	Allen et al. [1987] k [s <sup>-1</sup> , cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		Marconi und Mendis [1988] k [s <sup>-1</sup> , cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	Schmidt et al. [1988] k [s <sup>-1</sup> , cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]
<i>Photoreaktionen:</i>					
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>2</sub> + H	1.70·10 <sup>-4</sup>	-	(λ ≤ 3170 Å)	1.10·10 <sup>-4</sup>	1.70·10 <sup>-4</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → NH + H <sub>2</sub>	4.27·10 <sup>-6</sup>	-	(λ ≤ 2798 Å)	6.30·10 <sup>-5</sup>	4.00·10 <sup>-6</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → NH + H + H	2.61·10 <sup>-6</sup>	-		-	2.00·10 <sup>-6</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	7.88·10 <sup>-7</sup>	8.52·10 <sup>-7</sup>	(λ ≤ 1231 Å)	6.00·10 <sup>-7</sup>	6.10·10 <sup>-7</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H + e <sup>-</sup>	2.41·10 <sup>-7</sup>	2.00·10 <sup>-7</sup>	(λ ≤ 786 Å)	-	1.77·10 <sup>-7</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → NH <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	1.14·10 <sup>-8</sup>	6.09·10 <sup>-9</sup>	(λ ≤ 775 Å)	-	6.90·10 <sup>-9</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → N <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + H + e <sup>-</sup>	6.13·10 <sup>-9</sup>	-		-	3.25·10 <sup>-9</sup>
NH <sub>3</sub> + hv → H <sup>+</sup> + NH <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	6.31·10 <sup>-9</sup>	4.76·10 <sup>-9</sup>	(λ ≤ 681 Å)	-	3.30·10 <sup>-9</sup>
<i>Elektronenrekombination:</i>					
NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → Produkte	2.5·10 <sup>-6</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	2.4·10 <sup>-6</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		wie Allen et al.	wie hier
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → Produkte	3.9·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	1.3·10 <sup>-6</sup> · (300/T <sub>e</sub> ) <sup>0.6</sup>		wie Allen et al.	wie hier
<i>Wichtige Reaktionen mit Wasser:</i>					
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + NH <sub>3</sub> → NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	2.20·10 <sup>-9</sup>	2.20·10 <sup>-9</sup>		2.20·10 <sup>-9</sup>	wie hier
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + NH <sub>3</sub> → NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	2.21·10 <sup>-9</sup>	2.20·10 <sup>-9</sup>		2.20·10 <sup>-9</sup>	wie hier
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + NH <sub>3</sub> → NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + OH	9.45·10 <sup>-10</sup>	1.00·10 <sup>-9</sup>		1.00·10 <sup>-9</sup>	wie hier
NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O → NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> + OH	1.10·10 <sup>-10</sup>	-		2.50·10 <sup>-10</sup>	wie hier

Aus optischen Beobachtungen von P/Halley gewonnene NH<sub>3</sub>-Produktionsraten sind durchwegs um fast eine Größenordnung kleiner als die Werte in dieser Arbeit. Aus dem NH<sub>2</sub>-Band (ν<sub>2</sub>, ν<sub>2</sub>') = (10,0) bei einer Wellenlänge λ = 5700 Å bestimmten Wyckoff et al. [1991] aus drei unabhängigen Messungen für den Kometen P/Halley ein Q(NH<sub>3</sub>)/Q(H<sub>2</sub>O) = (0.20 ± 0.14)%. Da NH<sub>3</sub> nur über das Photodissoziationsprodukt NH<sub>2</sub> abgeleitet werden kann, benutzten Wyckoff et al. ein Haser-, ein Vektor- sowie ein Monte Carlo Modell, mit denen sie je unabhängig voneinander die zugehörige NH<sub>3</sub>-Dichte berechneten. Die Autoren weisen darauf hin, dass die NH<sub>2</sub>-Photoabsorptionsspektren nur aus theoretischen Modellen bekannt sind. In der oben angegebenen Fehlerschranke sind jedoch sowohl die messtechnischen wie auch die vom Modell abhängigen Fehler berücksichtigt worden.

Mit Hilfe eines Fabry-Perot Interferometers haben Magee-Saur et al. [1989] eine NH<sub>3</sub>-Kernproduktionsrate von 0.4% relativ zu Wasser ermittelt.

Eine offenkundige Erklärung für die Diskrepanz zwischen den optischen und den massenspektrometrischen *in situ* Messungen gibt es nicht. Beide Methoden sind auf Modelle angewiesen, die Fehler enthalten können: Nicht verstandene Anregungsmechanismen seitens der optischen Methoden oder falsche Reaktionskonstanten in der Ionenchemie im Falle der Massenspektrometer könnten mögliche Ursachen der systematischen Unterschiede erklären.



### 4.3 Ionen der Massen 31 bis 35 u/e - eine Übersicht

Gegenstand der Kapitel 4.4 bis 4.6 werden die Ionenmessungen auf den Massen 31 u/e bis 35 u/e sein. In den Ionenspektren des M-Analysators gelingt es, neben den Massenlinien 17 - 21 u/e auch die Massenlinien im Massenbereich 31 - 35 u/e den zugehörigen Ionen sowie deren Muttermolekülen zuzuordnen. In Tabelle 13 sind die möglichen Kandidaten für die Massenlinien 31 - 35 u/e aufgeführt. Die Tabelle enthält überdies auch jene Ionen, die aus der Liste gestrichen wurden, mit Begründung für deren Ausscheiden.

Die Ionen  $^{35}\text{Cl}^+$  und  $^{31}\text{P}^+$  werden auf Grund ihrer niedrigen kosmischen Häufigkeit als mögliche Hauptbeiträge zu den Massenlinien 35 u/e respektive 31 u/e ausgeschlossen. Silan ( $\text{SiH}_4$ ) wurde bisher nur im kohlenstoffreichen Superriesen IRC +10216 eindeutig nachgewiesen [Goldhaber und Betz, 1984; Turner, 1992]. Turner [1992] schätzt den Anteil der Si enthaltenden Gase relativ zur totalen Si-Häufigkeit im IRC +10216 auf  $\sim 10^{-2}$ . Geht man von einer kosmischen Häufigkeit  $[\text{Si}]/[\text{S}] \approx 2$  aus [Anders und Grevesse, 1989], so ist  $[\text{SiH}_4]/[\text{S}] \approx 0.02$  oder weniger. Komplexionen mit Wasser oder Derivaten von Wasser überleben bis ausserhalb 1000 km höchstens in vernachlässigbaren Mengen [Crifo, 1990]. Molekülionen, wie Wasserstoffperoxid-Ionen ( $\text{H}_2\text{O}_2^+$ ), protonierte Stickstoffmonoxid-Ionen ( $\text{HNO}^+$ ) oder  $\text{CH}_3\text{NH}_2^+$ -Ionen werden in der wasserdominierten Koma derart schnell umgebaut, dass von ihnen keine nennenswerte Beiträge zu erwarten sind. Die Masse 34 u/e kann zur Hauptsache nur durch schwerere Isotopionen der Massen 32 u/e und 33 u/e belegt werden. Hydrazin-Ionen ( $\text{NH}_2\text{NH}_2^+$ ) als wichtige Kandidaten für die Masse 32 u/e fallen ausser Betracht, da sonst der Isotopenbeitrag zur Masse 34 u/e aus der Masse 32 u/e zu gering ausfallen würde; ausgenommen man würde ein gegenüber dem terrestrischen Isotopenverhältnis ca. 10-fach angereichertes  $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ -Verhältnis annehmen.

**Tabelle 13:** Liste aller Ionen, die zu den Massenlinien 31 - 35 u/e beitragen könnten. In der dritten Spalte sind diejenigen Ionen aufgeführt, die aus der Liste der möglichen Kandidaten gestrichen worden sind. Der Ausscheidungsgrund steht in der vierten, d.h. in der Kommentarspalte.

Masse [u/e]	Liste der identifizierten Ionen	Ionen, die als mögliche Interferenzen ausscheiden	Kommentar
35	$\text{H}_3\text{S}^+$ $\text{CH}_3^{18}\text{OH}_2^+$	$\text{Cl}^+$ $\text{NH}_4\text{OH}^+$ $\text{H}_2^{33}\text{S}^+$ $\text{H}^{34}\text{S}^+$ Komplexionen, die $\text{H}_2\text{O}$ oder Bruchstücke von $\text{H}_2\text{O}$ enthalten	Niedrige kosmische Häufigkeit: $[\text{Cl}]/[\text{S}] = 0.01$ [Anders und Grevesse, 1989] Sehr unwahrscheinlich [Marconi et al., 1990] Vernachlässigbar, da es nur wenig $34^+$ -Ionen gibt Der $\text{HS}^+$ -Beitrag zur Masse 33 u/e ist verschwindend klein Sehr unwahrscheinlich [Marconi et al., 1990; Crifo, 1990]

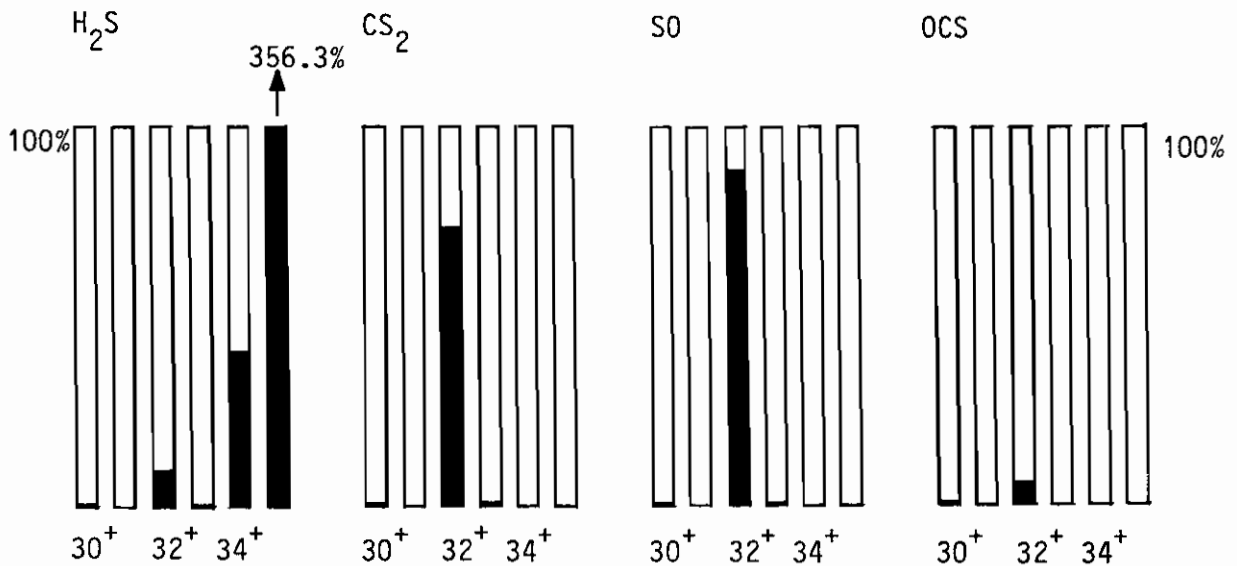
(Fortsetzung Tabelle 13)

Masse [u/e]	Liste der identifizierten Ionen	Ionen, die als mögliche Interferenzen ausscheiden	Kommentar
34	$^{34}\text{S}^+$ $\text{H}_2\text{S}^+$ $^{13}\text{CH}_3\text{OH}_2^+$ $\text{CH}_3^{17}\text{OH}_2^+$ $\text{DH}_4\text{CO}^+$ $\text{CH}_3^{18}\text{OH}^+$	$\text{H}_2\text{O}_2^+$ $\text{H}_3\text{P}^+$ $^{18}\text{OO}^+$ $\text{H}^{33}\text{S}^+$	Auf Grund der Ionenchemie kein wesentlicher Beitrag möglich Siehe Masse 31 u/e Niedrige $\text{O}_2$ -Häufigkeit Der $\text{HS}^+$ -Beitrag zur Masse 33 ist verschwindend klein
33	$\text{CH}_3\text{OH}_2^+$ $\text{HS}^+$	$\text{H}_2\text{P}^+$ $\text{HO}_2^+$ $\text{SiH}_3^+$ $\text{H}_3\text{C}^{18}\text{O}^+$	Siehe Masse 31 u/e Wird sehr schnell zerstört Siehe Masse 32 u/e und 31 u/e Vernachlässigbar
32	$\text{S}^+$ $\text{CH}_3\text{OH}^+$	$\text{O}_2^+$ $\text{SiH}_4^+$  $\text{HP}^+$ $\text{N}_2\text{H}_4^+$  $\text{H}_3^{13}\text{CO}^+$	Niedrige $\text{O}_2$ -Häufigkeit Wurde bisher nur in der Umgebung des Superriesen IRC +10216 nachgewiesen [Goldhaber und Betz, 1984, Turner, 1992]. Der Anteil Si-enhaltender Gase relativ zur totalen Si-Häufigkeit beträgt nach Turner [1992] $\sim 10^{-2}$ , womit $[\text{Si gasförmig}]/[\text{S}] \approx 0.02$ [Anders und Grevesse, 1989] Siehe Masse 31 u/e Damit die Masse 34 u/e erklärt werden kann, wäre ein Faktor 10 über dem terrestrischen $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$ -Verhältnis liegendes Stickstoffisotopenverhältnis notwendig Vernachlässigbar
31	$\text{H}_3\text{CO}^+$	$\text{SiH}_3^+$ $^{31}\text{P}^+$  $\text{CH}_3\text{NH}_2^+$  $\text{HNO}^+$  $\text{N}_2\text{H}_3^+$	Siehe $\text{SiH}_4^+$ Niedrige kosmische Häufigkeit $\text{P/S} = 0.02$ [Anders und Grevesse, 1989] Ist im Kometen Levey optisch gesucht aber nicht beobachtet worden [Colom et al., 1991]. Colom et al. geben jedoch keine obere Grenze an. Dissoziiert ausserdem sofort in $\text{CH}_3$ und $\text{NH}_2$ Wird selbst bei hohen Konzentrationen von $\text{NO}$ praktisch nicht gebildet Siehe $\text{N}_2\text{H}_4^+$

#### 4.4 Schwefelwasserstoff ( $\text{H}_2\text{S}$ ) im Kometen P/Halley

In den NMS Ionenspektren des M-Analysators fallen einzig  $\text{H}_3\text{S}^+$ -Ionen auf die Masselinie

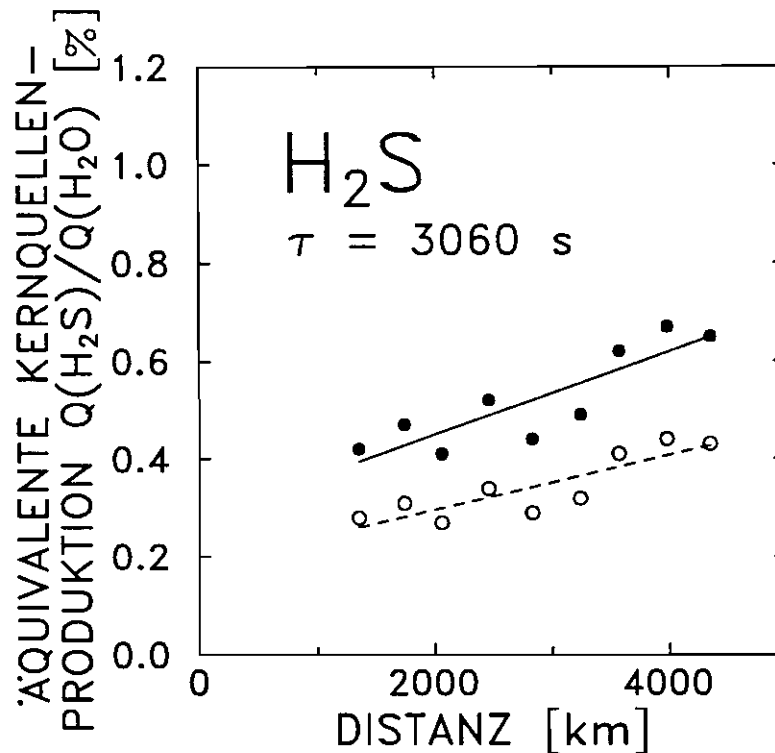
35 u/e. Von den untersuchten, Schwefel enthaltenden Verbindungen  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{H}_2\text{CS}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{S}_2$ ,  $\text{SO}$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{C}_2\text{S}$  und  $\text{OCS}$  bildet nur Schwefelwasserstoff ( $\text{H}_2\text{S}$ ) über Protonenanlagerung aus  $\text{H}_2\text{O}^+$  und  $\text{H}_3\text{O}^+$  erwähnenswerte Mengen an protonierten Schwefelwasserstoffionen  $\text{H}_3\text{S}^+$  (Figur 39). Man darf also davon ausgehen, dass  $\text{H}_3\text{S}^+$  in sehr guter Näherung ausschliesslich aus Schwefelwasserstoff entsteht.



**Figur 39:** Beispiele von gerechneten Ionenspektren im Massenbereich 30 u/e bis 35 u/e für diverse schwefelhaltige Moleküle  $A_i$ , ohne Berücksichtigung von Beiträgen durch seltenere, schwere Isotope ( $R = 2460$  km). Als Koma wurde die  $\text{H}_2\text{O-NH}_3$ -Standardkoma nach Kapitel 4.2 verwendet, wobei zusätzlich bei einem Verhältnis von  $Q(A_i)/Q(\text{H}_2\text{O}) = 1\%$  Moleküle  $A_i$  beigegeben wurden. Die offenen Balken stellen wiederum die gemessenen Ionendichten dar, normiert auf 100%. Wie bereits im Text vermerkt, ergibt lediglich  $\text{H}_2\text{S}$  einen bedeutenden Beitrag zur Masse 35 u/e ( $\text{H}_3\text{S}^+$ ).

Auf der Masse 35 u/e stehen uns innerhalb der Kontaktfläche im Abstand von 1'350 bis 4'350 km Ionenmessungen zur Verfügung (M-Analysator). Die radiale Auflösung beträgt  $\sim 400$  km. Für jeden Messpunkt zeigt Figur 39 die entsprechende, gerechnete Schwefelwasserstoff-Kernproduktionsrate  $Q(\text{H}_2\text{S})$  relativ zur Wasserproduktionsrate  $Q(\text{H}_2\text{O})$ . Die offenen Kreise entstanden auf Grund der linearen Approximationsmethode nach Kapitel 4.1 (1%-Methode). Als Standardkoma wurde die  $\text{H}_2\text{O-NH}_3$ -Koma aus Kapitel 4.2 verwendet. Die ausgefüllten Kreise in der gleichen Figur 40 sind nachkorrigierte Werte: Eine Gesamtrechnung mit allen Molekülen, die bisher und in dieser Arbeit mit dem NMS identifiziert worden sind, ergibt im Vergleich mit der linearen Approximationsmethode leicht weniger hohe Ionendichten (siehe Kapitel 4.9). Die Kernproduktionsrate von  $\text{H}_2\text{S}$  muss dementsprechend grösser gewählt werden als die lineare Approximationsmethode voraussagt. In guter Näherung dürfen die mit der linearen Approximationsmethode ermittelten  $Q(\text{H}_2\text{S})/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Verhältnisse mit einem konstanten Streckfaktor auf die mit der Gesamtrechnung bestimmten Kernproduktionsrate angepasst werden. Die fetten Kreise in der Figur 40 sind durch eine derartige lineare Streckung aus den offenen Kreisen konstruiert worden. *Alle gleichartigen Figuren in den*

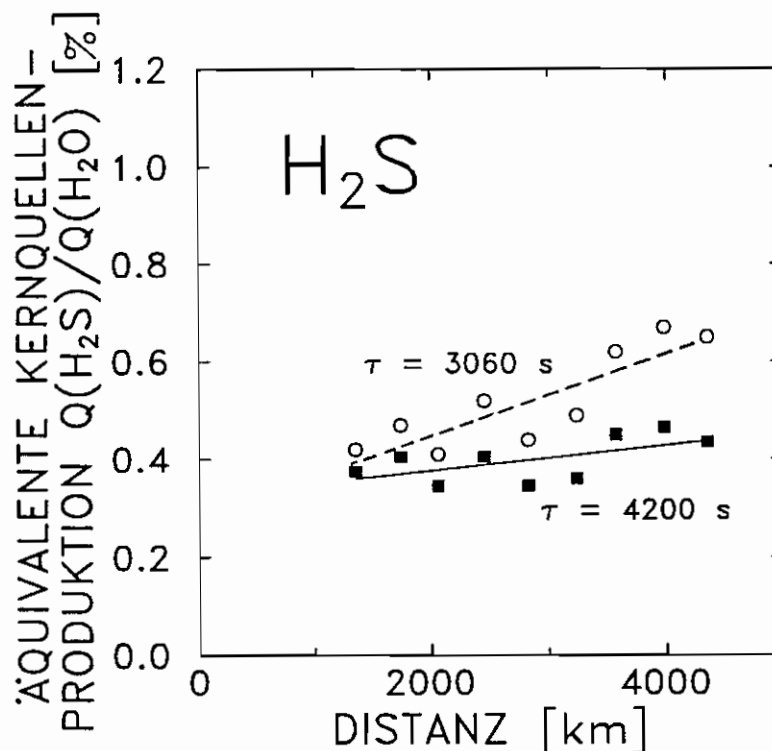
verbleibenden Kapiteln sind genau gleich nachkorrigiert worden, wie eben am Beispiel von  $H_2S$  demonstriert wurde.



**Figur 40:** Schwefelwasserstoff Kernproduktionsraten, abgeleitet aus der  $35^+$ -Häufigkeit ( $H_2S^+$ ) des NMS M-Analysators innerhalb der Kontaktfläche von P/Halley. Die offenen Symbole basieren auf einer Koma, in der sich neben  $H_2S$  nur  $H_2O$  und  $NH_3$  befinden. Die ausgefüllten Symbole zeigen die Auswertung, die auf eine Koma mit erweiterter Molekülzusammensetzung nachkorrigiert wurde (Streckfaktor  $f = 1.52$ , siehe Kapitel 4.9). Man vergleiche auch mit dem Text. Eingetragen ist ebenfalls eine lineare Regressionsgerade durch die Punkteschar der ausgefüllten Symbole ( $y = 0.280 + 0.0850 \cdot R[1000 \text{ km}]$ ).

Falls die Lebensdauer von Schwefelwasserstoff bei 1 AE tatsächlich  $\sim 3000$  s beträgt, wie wir aus den Photoreaktionsdaten von *Huebner et al.* [1989] mit einem  $\kappa = 0.18$  entnommen haben, dann steigt die aus den einzelnen Messpunkten berechnete  $H_2S$ -Quellenproduktionsrate mit zunehmendem Abstand  $R$ . Es gibt zwei Möglichkeiten, diese ansteigende  $H_2S$ -Quellenproduktionsrate zu erklären: Entweder ist die  $H_2S$ -Lebensdauer falsch, oder eine zusätzliche Quelle ausserhalb des Kometenkerns steuert der expandierenden Koma weitere  $H_2S$ -Moleküle bei. Die Funktion einer derartigen zusätzlichen Quelle (*ausgedehnte Quelle*) könnte beispielsweise der Staub oder ein schwereres Molekül, das über Dissoziation  $H_2S$

produziert, übernehmen. Basierend auf UV-Absorptionsspektren von *Lee et al.* [1987] berechneten *Bockelée-Morvant et al.* [1990] eine wesentlich höhere  $H_2S$ -Lebensdauer von  $\sim 4000$  s bei einem Sonnenabstand von 1 AE und einem Sonnenaktivitätsminimum. Für eine noch leicht höhere Lebensdauer  $\tau = 4200$  s sind in Figur 41 die nachkorrigierten Kernproduktionsraten für  $H_2S$  mit Quadraten dargestellt. Bei dieser erhöhten Lebensdauer liegt der Fehler der Geradensteigung (65%) in der Größenordnung der Steigung selbst. Innerhalb der Kontaktfläche ist deshalb das  $H_2S$ -Radialprofil mit einer reinen Kernproduktion erklärbar, sofern eine  $H_2S$ -Lebensdauer um 4200 s angenommen wird. Aus der Figur 41 kann eine *mittlere* Quellenproduktionsrate von  $Q(H_2S)/Q(H_2O) = 0.40\%$  herausgelesen werden.



**Figur 41:** Schwefelwasserstoff-Kernproduktionsrate, abgeleitet aus der  $35^+$ -Häufigkeit ( $H_2S^+$ ) in den NMS-Ionenspektren des M-Analysators innerhalb der Kontaktfläche. Die Datenpunkte sind auf die Gesamtrechnung aus Kapitel 4.9 nachkorrigiert.

Kreise:  $\tau(H_2S) = 3060$  s bei 1 AE [*Huebner et al.*, 1989]

Quadrate:  $\tau(H_2S) = 4200$  s bei 1 AE

Die Gleichung der linearen Regression durch die Kreise lautet:  $y = 0.280 + 0.0850 \cdot R[1000 \text{ km}]$ . Die entsprechende Regression durch die Quadrate ist  $y = 0.324 + 0.0261 \cdot R[1000 \text{ km}]$ .

Die wichtigsten Reaktionen der Schwefelwasserstoffchemie fasst Tabelle 14 zusammen. Die  $H_2O$ - und  $NH_3$ -Reaktionen sind in Tabelle 11 zusammengefasst. Wichtige Kreuzreaktionen mit weiteren Molekülen und Radikalen, die bei der Gesamtrechnung mit der erweiterten Muttermolekülzusammensetzung wichtig werden, zeigt Tabelle 20 in Kapitel 4.9.

**Tabelle 14:** Die wichtigsten H<sub>2</sub>S-Photoreaktionen und Reaktionen mit H<sub>2</sub>O. Bei Reaktionen von Wasser und Ammoniak untereinander sei auf Tabelle 11 verwiesen. Bei Kreuzreaktionen mit anderen Spezies sei auf Tabelle 20 verwiesen.

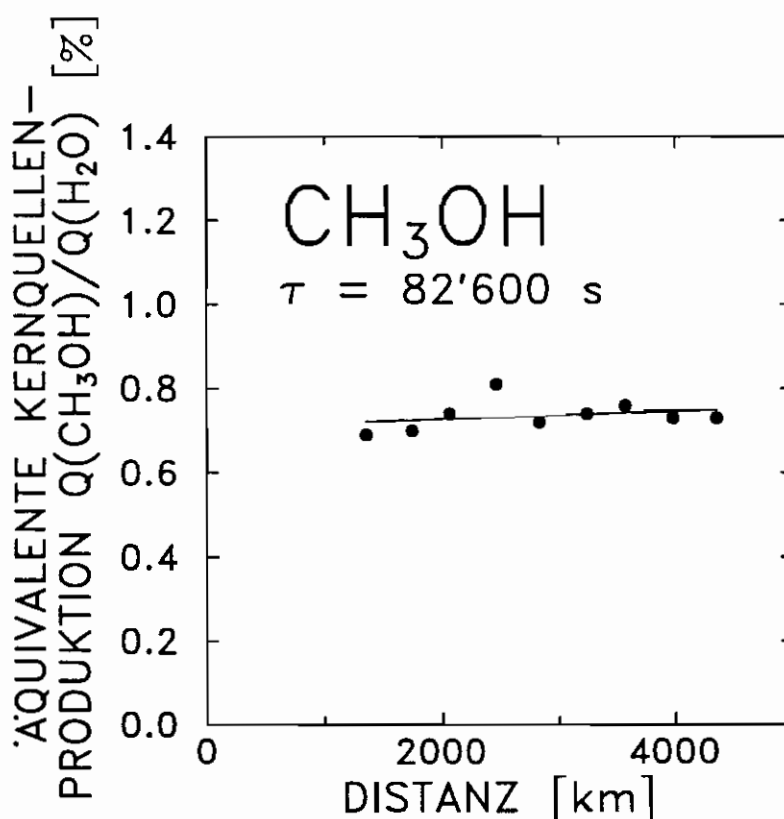
Reaktion	Reaktionskonstante k <sub>i</sub> [s <sup>-1</sup> ] (R = 1 AE)		Literaturquelle	
	Sonnenaktivitäts- minimum	Sonnenaktivitäts- maximum		
<i>Photoreaktionen:</i>				
H <sub>2</sub> S + hv → HS + H	2.32·10 <sup>-4</sup>	(3.20·10 <sup>-4</sup> )	2.62·10 <sup>-4</sup> (3.60·10 <sup>-4</sup> )	siehe Text
H <sub>2</sub> S + hv → H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	5.60·10 <sup>-7</sup>		1.20·10 <sup>-6</sup>	Huebner et al. [1989]
H <sub>2</sub> S + hv → HS <sup>+</sup> + H + e <sup>-</sup>	7.30·10 <sup>-8</sup>		2.20·10 <sup>-7</sup>	"
H <sub>2</sub> S + hv → S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	1.50·10 <sup>-7</sup>		4.10·10 <sup>-7</sup>	"
HS + hv → S + H	6.90·10 <sup>-3</sup>		6.90·10 <sup>-3</sup>	"
HS + hv → HS <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	9.00·10 <sup>-7</sup>		1.80·10 <sup>-6</sup>	"
S + hv → S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	1.10·10 <sup>-6</sup>		2.60·10 <sup>-6</sup>	"
S( <sup>1</sup> D) + hv → S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	1.10·10 <sup>-6</sup>		2.70·10 <sup>-6</sup>	"
S( <sup>1</sup> S) + hv → S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	1.00·10 <sup>-6</sup>		2.50·10 <sup>-6</sup>	"
Reaktion	Reaktionskonstante k <sub>i</sub> [cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		Literaturquelle	
<i>Elektronenrekombination:</i>				
H <sub>3</sub> S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub> S + H	3.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		Millar et al. [1991]	
H <sub>3</sub> S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → HS + H + H	1.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"	
H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → HS + H	1.50·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"	
H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → S + H + H	1.50·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"	
HS <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → S + H	2.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"	
<i>Weitere Reaktionen:</i>				
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> S → H <sub>3</sub> S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	1.90·10 <sup>-9</sup>		Millar et al. [1991]	
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> S → H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + HS	5.40·10 <sup>-11</sup>		"	
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> S → H <sub>3</sub> S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	7.74·10 <sup>-10</sup>		"	
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> S → H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	9.72·10 <sup>-10</sup>		"	
H <sub>3</sub> S <sup>+</sup> + H → H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub>	6.00·10 <sup>-11</sup>		"	
H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O → H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + HS	8.10·10 <sup>-10</sup>		"	
H <sub>2</sub> S <sup>+</sup> + H → HS <sup>+</sup> + H <sub>2</sub>	2.00·10 <sup>-10</sup>		"	
S <sup>+</sup> + OH → SO <sup>+</sup> + H	6.10·10 <sup>-10</sup>		"	
S + OH → SO + H	1.00·10 <sup>-10</sup>		"	
HS + H → S + H <sub>2</sub>	2.50·10 <sup>-11</sup>		"	
Insgesamt verwendete Anzahl Reaktionen:		2484		

## 4.5 Methanol (CH<sub>3</sub>OH) im Kometen P/Halley

In den NMS Ionenspektren des M-Analysators belegen primär protonierte Methanolionen CH<sub>3</sub>OH<sub>2</sub><sup>+</sup> die Masselinie 33 u/e. Die H<sub>2</sub>S-Kernproduktion von Kapitel 4.4 fixiert den HS<sup>+</sup>-Beitrag zur Masse 33 u/e. Wenn in den NMS Ionenspektren alle Ionen der Masse 31 u/e protoniertes Formaldehyd sind, kann ebenfalls der maximale H<sub>3</sub>C<sup>18</sup>O<sup>+</sup>-Anteil zur Masse 33 u/e

bestimmt werden. Vorausgesetzt wird hierbei wiederum ein terrestrisches  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ -Verhältnis. Im Verlaufe der Auswertung stellte sich aber heraus, dass der Beitrag durch  $\text{H}_3\text{C}^{18}\text{O}^+$ -Ionen zur Masse 33 u/e vernachlässigbar klein ist. Das verbleibende, nicht durch  $\text{HS}^+$ -Ionen erklärte, gemessene Signal auf der Masse 33 u/e muss durch  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  aufgefüllt werden.

$\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  entsteht aus Methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ). Der hauptsächliche Produktionsweg von  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$  geschieht über Anlagerung von Protonen aus  $\text{H}_3\text{O}^+$  an Methanol. Die Figur 42 zeigt die Methanol Quellenproduktionsrate, die mit Hilfe des Komamodelles für jeden Messpunkt berechnet wurde. Analog zu Kapitel 4.4 wurde auf die Gesamtrechnung in Kapitel 4.9 nachkorrigiert. Die Detektor Yield-Korrekturen werden für jeden Messwert nach den relativen Ionenbeiträgen berücksichtigt. Innerhalb der Kontaktfläche ergeben die einzelnen Datenpunkte eine einheitliche, vom radialen Abstand zum Kometenkern unabhängige Kernproduktionsrate. Sie beträgt nach Figur 42 im Mittel  $Q(\text{CH}_3\text{OH})/Q(\text{H}_2\text{O}) = 0.74\%$ .



**Figur 42:** Methanol Kernproduktionsrate, abgeleitet vom Massenkanal 33<sup>+</sup> (hauptsächlich  $\text{CH}_3\text{OH}_2^+$ ) des NMS M-Analysators. Alle Messpunkte liegen innerhalb der Kontaktfläche des Kometen P/Halley. Eine Nachkorrektur der Kernproduktionsraten aufgrund eines erweiterten Komamodelles wurde im Sinne von Kapitel 4.4 vorgenommen. Die Regressionsgerade durch die Punkteschar lautet:  $y = 0.709 + 0.0095 \cdot R[1000 \text{ km}]$  (Streckfaktor  $f = 1.19$ ).

In der Tabelle 15 sind die wichtigsten Reaktionen von Methanol sowie dessen Radikale und Ionen mit einer  $\text{H}_2\text{O}$ - $\text{NH}_3$ -Koma aufgeführt. Wichtige Reaktionen mit anderen Komponenten in der Koma sind in Tabelle 20 nachzuschlagen.

Nach einer persönlichen Mitteilung von *Huebner* [1991] und *Boice* [1991] ergibt eine genauere Analyse der Photoabsorptionsspektren von *Bass et al.* [1980] eine wesentlich längere Methanollebensdauer als *Huebner et al.* [1989] ursprünglich vermuteten (in Tabelle 15 kursiv aufgeführt). Das Problem der Methanollebensdauer ist der langgezogene Ausläufer in den Absorptionsspektren bei tiefen UV-Energien, dessen Ausdehnung gegen tiefe Energien nur abgeschätzt werden kann. Zwischen 2053 Å und 13'500 Å (Schwellenenergie) existieren nämlich keine experimentell bestimmten Wirkungsquerschnitte von CH<sub>3</sub>OH. Es ist nur bekannt, dass der Wirkungsquerschnitt  $\leq 10^{-22}$  cm<sup>2</sup> ist. Da aber der mit dem Absorptionsspektrum von CH<sub>3</sub>OH zu faltende Sonnenfluss gegen sichtbare Wellenlängen hin stark ansteigt, ist der angesprochene Wellenlängenbereich für die Photodissoziation von Methanol nicht unbedeutend. Bei der revidierten Photodissoziationskonstanten nehmen wir an, dass der CH<sub>3</sub>OH-Absorptionswirkungsquerschnitt stetig von 10<sup>-22</sup> cm<sup>2</sup> bei 2053 Å auf 10<sup>-25</sup> cm<sup>2</sup> bei 13'500 Å sinkt. In der früheren Auswertung wurde ein bis zur Schwellenwellenlänge konstanter Wirkungsquerschnitt vorausgesetzt. Statt der ursprünglich angenommenen Lebensdauer  $\tau_{akt}(\text{CH}_3\text{OH}) = 18'400$  s schlägt *Boice* daher eine Methanollebensdauer von  $\tau(\text{CH}_3\text{OH}) = 82'600$  s vor (Lebensdauer bei 1 AE und  $\kappa = 0.18$ ). In der vorliegenden Arbeit ist stets mit dieser revidierten CH<sub>3</sub>OH-Lebensdauer gerechnet worden. Es sei schliesslich an dieser Stelle erwähnt, dass *Bockelée-Morvant et al.* [1990] aus dem UV-Absorptionsspektrum von *Nee et al.* [1985] eine Methanollebensdauer von  $\tau = 77'000$  s (1 AE, Sonnenaktivitätsminimum) ableiteten.

**Tabelle 15:** Die wichtigsten CH<sub>3</sub>OH-Reaktionen in einer reinen H<sub>2</sub>O-NH<sub>3</sub>-Koma. Bei Reaktionen von Wasser und Ammoniak untereinander sei auf Tabelle 11 verwiesen. Bei Kreuzreaktionen mit anderen als der hier aufgeführten Spezies sei auf Tabelle 20 verwiesen. Die eingeklammerten Photodissoziationsreaktionen in Kursivschrift werden im Text als  $k_{akt}$  resp.  $\tau_{akt} = 1/k_{akt}$  bezeichnet.

Reaktion	Reaktionskonstante $k_i$ [s <sup>-1</sup> ] ( $R = 1$ AE)		Literaturquelle
	Sonnenaktivitätsminimum	Sonnenaktivitätsmaximum	
<i>Photoreaktionen:</i>			
CH <sub>3</sub> OH + <i>hν</i> → H <sub>2</sub> CO + H <sub>2</sub> ( <i>5.10·10<sup>-5</sup></i> )	1.02·10 <sup>-5</sup>	1.22·10 <sup>-5</sup> ( <i>6.10·10<sup>-5</sup></i> )	siehe Text
CH <sub>3</sub> OH + <i>hν</i> → CH <sub>3</sub> + OH ( <i>5.70·10<sup>-7</sup></i> )	5.58·10 <sup>-7</sup>	1.08·10 <sup>-6</sup> ( <i>1.10·10<sup>-6</sup></i> )	<i>Huebner et al.</i> [1989]
CH <sub>3</sub> OH + <i>hν</i> → CH <sub>3</sub> OH <sup>+</sup> + e <sup>-</sup>	4.90·10 <sup>-7</sup>	1.10·10 <sup>-6</sup>	"
CH <sub>3</sub> OH + <i>hν</i> → H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + H + e <sup>-</sup>	1.20·10 <sup>-7</sup>	2.80·10 <sup>-7</sup>	"
CH <sub>3</sub> OH + <i>hν</i> → H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> + e <sup>-</sup>	1.20·10 <sup>-7</sup>	2.80·10 <sup>-7</sup>	"
Reaktion	Reaktionskonstante $k_i$ [cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]		Literaturquelle
<i>Elektronenrekombination:</i>			
CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> OH + H	3.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		<i>Millar et al.</i> [1991]
CH <sub>3</sub> OH <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → CH <sub>3</sub> + OH	3.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )		"
<i>Weitere Reaktionen:</i>			
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + CH <sub>3</sub> OH → CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	2.50·10 <sup>-9</sup>		<i>Millar et al.</i> [1991]
CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>3</sub> C <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub>	1.00·10 <sup>-9</sup>		"
CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + CH <sub>3</sub> OH → C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> OH <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	4.50·10 <sup>-10</sup>		"
H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + CH <sub>3</sub> OH → CH <sub>3</sub> OH <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO	1.90·10 <sup>-9</sup>		"



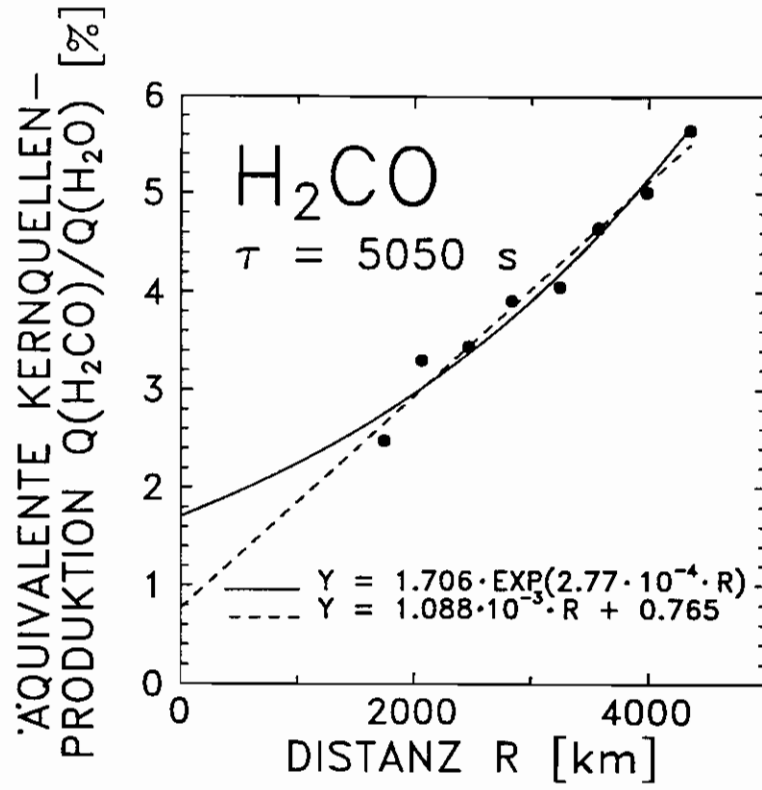
## 4.6 Formaldehyd (H<sub>2</sub>CO) in der Koma von P/Halley

Formaldehyd ist ein in Molekularwolken häufig beobachtetes Molekül, das aber vor der Rückkehr des Kometen P/Halley in das innere Sonnensystem in keinem Kometen eindeutig nachgewiesen werden konnte [Weaver *et al.*, 1991]. Combes *et al.* [1988] sowie Mumma und Reuter [1989] bestimmten aus denselben Infrarotspektren von P/Halley eine relativ hohe H<sub>2</sub>CO-Produktionsrate von ~4 - 4.5% relativ zur Wasserproduktionsrate. Snyder *et al.* [1989] fanden mit Hilfe des VLA-Radioteleskopes (VLA: *Very Large Array*) aus der Radioemissionslinie bei 5 GHz (1<sub>11</sub>-1<sub>10</sub> Übergang) ein  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O})$ -Verhältnis von 1.5%.

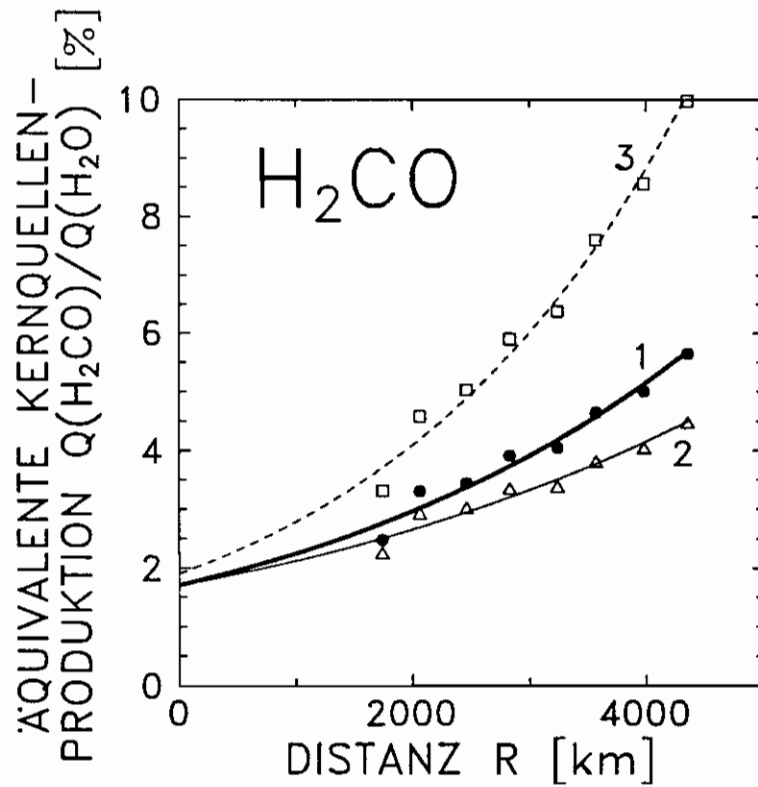
In den Neutralspektren tragen zur Masselinie 30 u/e neben H<sub>2</sub>CO und Fragmenten von schwereren Molekülen auch Ethan (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) und eventuell Stickstoffmonoxid (NO) bei. Die Produktionsrate von Formaldehyd muss also aus den Ionenspektren herausgelesen werden. Die mit dem NMS M-Analysator gemessenen Ionen der Masse 31<sup>+</sup> sind protonierte Formaldehydionen H<sub>3</sub>CO<sup>+</sup>. Sie bilden sich in erster Linie aus Formaldehyd (H<sub>2</sub>CO). Wie in den vorangehenden Kapiteln wird aus den gemessenen 31<sup>+</sup>-Ionen die äquivalente Kernproduktionsrate  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O})$  berechnet. Die äquivalente (scheinbare) Kernproduktionsrate von Formaldehyd steigt mit zunehmender Entfernung  $R$  zum Kometenkern an (Figur 43a). Je weiter man sich vom Kern entfernt desto höher muss also die Kernproduktionsrate sein. Falls der Abbau von Formaldehyd durch Photodissoziation zu rasch erfolgt, ist mit steigendem Abstand  $R$  tatsächlich eine immer grössere Kernproduktion notwendig, damit die gemessene Ionendichte erklärt werden kann. Allerdings könnte erst eine *sieben* mal höhere H<sub>2</sub>CO-Lebensdauer den beobachteten Anstieg in der scheinbaren Kernproduktion  $Q(\text{H}_2\text{CO})$  zum Verschwinden bringen. Wie die Zusammenstellung in Tabelle 16 zeigt, liegt eine sieben mal höhere H<sub>2</sub>CO-Lebensdauer deutlich ausserhalb der Unsicherheit beziehungsweise Streuung der Literaturwerte. Eine alternative Erklärung der (scheinbaren) Kernproduktionsrate ist eine *räumlich ausgedehnte* Formaldehydquelle. Eine derartige Quelle leitet ausserhalb des eigentlichen Kometenkerns neue H<sub>2</sub>CO-Moleküle in die gasförmige Koma ein, und lässt so die scheinbare Kernproduktionsrate mit grösser werdendem  $R$  ansteigen.

Huebner *et al.* [1989] verwendeten bei der Berechnung der Reaktionskonstante zur Reaktion  $\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$  relativ alte Formaldehyd-Absorptionsspektren aus einem Buch von Calvert und Pitts [1966]. Aus neueren UV-Absorptionsspektren [Bass *et al.*, 1980] erhält man deutlich andere Lebensdauern als Huebner *et al.* (Tabelle 16). Der ursprüngliche Wert von Huebner *et al.* [1989] betrug  $\tau = 3580$  s ( $\kappa = 0.18$ , Sonnenabstand von 1 AE). Neben den revidierten Reaktionskonstanten enthält die Tabelle auch noch weitere Photoreaktionskonstanten. In Figur 43b sind die zugehörigen äquivalenten Produktionsraten aufgeführt.

- Figur 43:** a) (Nächste Seite) Die äquivalente Kernproduktionsrate von Formaldehyd, berechnet aus [31<sup>+</sup>] (H<sub>3</sub>CO<sup>+</sup>). Als Lebensdauer gegen Photodestruktion wurde  $\tau = 5050$  s bei 1 AE verwendet. Dieser Wert entspricht einer provisorischen Lebensdauerberechnung auf Grund des von Bass *et al.* [1980] gemessenen Absorptionsspektrums [Huebner *et al.*, 1991]. Man vergleiche auch mit der Figur 43b (Kurve 1) und Tabelle 16.
- b) (Nächste Seite) Wie Figur 43a, aber für verschiedene Lebensdauern von H<sub>2</sub>CO. Die Nummern, mit denen die einzelnen Kurven beschriftet sind, entsprechen den Nummern unter Tabelle 16. Durch jedes Datenset wurde auch eine Exponentialfunktion gelegt:
- 1:  $\dot{Y}_i = 1.7058 \cdot \exp(2.7684 \cdot 10^{-4} \cdot R[\text{km}])$
  - 2:  $\dot{Y}_i = 1.6972 \cdot \exp(2.2420 \cdot 10^{-4} \cdot R[\text{km}])$
  - 3:  $\dot{Y}_i = 1.9004 \cdot \exp(3.8398 \cdot 10^{-4} \cdot R[\text{km}])$

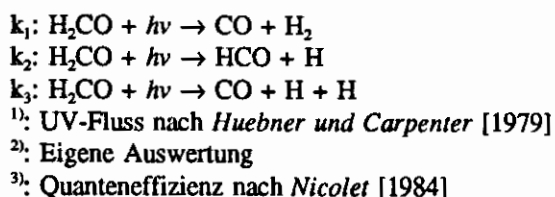


(Figur 43a)



(Figur 43b)

**Tabelle 16:** Photoreaktionen von Formaldehyd bei einem Sonnenabstand von 1 AE (siehe auch Text und Figur 43). Die untere Hälfte der Tabelle ist für alle Varianten gleich. Die Reaktionskonstanten in der oberen Hälfte der Tabelle beziehen sich auf ein Sonnenaktivitätsminimum.



Literaturverweis:	$k_1$ [ $\text{s}^{-1}$ ]:	$k_2$ [ $\text{s}^{-1}$ ]:	$k_3$ [ $\text{s}^{-1}$ ]:	Nummer der Auswertung
<i>Huebner und Carpenter</i> [1979]	$1.62 \cdot 10^{-4}$	$8.50 \cdot 10^{-5}$	$3.23 \cdot 10^{-5}$	
<i>Huebner et al.</i> [1989]	$1.60 \cdot 10^{-4}$	$8.40 \cdot 10^{-5}$	$3.20 \cdot 10^{-5}$	3
<i>Huebner et al.</i> [1991]	$9.86 \cdot 10^{-5}$	$6.38 \cdot 10^{-5}$	$3.21 \cdot 10^{-5}$	1
<i>Bass</i> [1980] 223 K <sup>1), 2), 3)</sup>	$4.71 \cdot 10^{-5}$	$7.48 \cdot 10^{-5}$		2

Photoreaktion	Reaktionskonstante $k_i$ [ $\text{s}^{-1}$ ]		Literaturquelle
	Sonnenaktivitätsminimum	Sonnenaktivitätsmaximum	
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{H}_2\text{CO}^* + e^-$	$4.00 \cdot 10^{-7}$	$9.10 \cdot 10^{-7}$	<i>Huebner et al.</i> [1989]
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{HCO}^* + \text{H} + e^-$	$2.00 \cdot 10^{-7}$	$5.20 \cdot 10^{-7}$	"
$\text{H}_2\text{CO} + h\nu \rightarrow \text{CO}^* + \text{H}_2 + e^-$	$1.20 \cdot 10^{-7}$	$5.80 \cdot 10^{-7}$	"

Auf die möglichen Ursachen der in allen in Tabelle 16 aufgeführten Szenarien beobachten ausgedehnten  $\text{H}_2\text{CO}$ -Quelle wird im nächsten Kapitel eingegangen. In die Punktescharen von Figur 43 wurden Exponentialfunktionen eingepasst. Es zeigt sich, dass die Summe der Abweichungsquadrate bei Exponentialfunktionen geringfügig kleiner wird als bei linearen Funktionen. In der Figur 43b sind zum Vergleich beide Anpassungskurven, d.h. sowohl die lineare Funktion wie auch die Exponentialfunktion eingetragen. Der auf  $R = 0$  km extrapolierte Wert  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O})$  fällt je nach Wahl der Funktion deutlich verschieden aus. Der unterste Datenpunkt setzt eine obere Schranke für die Kernproduktionsrate  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O})$  von Formaldehyd. Je nach Lebensdauer erhält man eine obere Grenze  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O}) = 2.3 - 3.3\%$ . Aufgeschlüsselt nach den einzelnen Auswertungen No. 1 - 3 lauten die oberen Grenzen:

Auswertung Nr. 1: 2.5%  
 Auswertung Nr. 2: 2.3%  
 Auswertung Nr. 3: 3.3%

Die mit den Exponentialfits extrapolierten Kernproduktionsraten von Formaldehyd ergeben für alle drei Auswertungen  $\sim 1.7 - 1.9\%$ .

Der Vollständigkeit halber sind von  $\text{H}_2\text{CO}$  in Tabelle 17 die wichtigsten Photoreaktionen und Reaktionen mit  $\text{H}_2\text{O}$  zusammengefasst. Tabelle 20 in Kapitel 4.9 ergänzt diese Reaktionen mit solchen, die erst mit der Gesamtrechnung auftraten.

**Tabelle 17:** Die wichtigsten H<sub>2</sub>CO-Reaktionen in einer reinen H<sub>2</sub>O-NH<sub>3</sub>-Koma. Die Photoreaktionen von H<sub>2</sub>CO sind in Tabelle 16 zu finden. Bei Reaktionen von Wasser und Ammoniak untereinander sei auf Tabelle 11 verwiesen. Bei Kreuzreaktionen mit anderen Spezies sei auf Tabelle 20 verwiesen.

Reaktion	Reaktionskonstante $k_r$ [cm <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> ]	Literaturnachweis
<i>Elektronenrekombination:</i>		
H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → H <sub>2</sub> CO + H	2.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	Millar et al. [1991]
H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → HCO + H + H	2.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	"
H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → CO + H <sub>2</sub> + H	2.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	"
H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → HCO + H	1.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	"
H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> → CO + H + H	5.00·10 <sup>-7</sup> · √(300/T <sub>e</sub> )	"
<i>Weitere Reaktionen:</i>		
H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	3.40·10 <sup>-9</sup>	Millar et al. [1991]
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O	1.41·10 <sup>-9</sup>	"
H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + OH	6.62·10 <sup>-10</sup>	"
OH <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + O	1.12·10 <sup>-9</sup>	"
OH <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + OH	7.44·10 <sup>-10</sup>	"
H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O → H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO	2.30·10 <sup>-10</sup>	"
H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> CO → H <sub>3</sub> CO <sup>+</sup> + HCO	3.20·10 <sup>-9</sup>	"
H <sub>2</sub> CO <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O → H <sub>3</sub> O <sup>+</sup> + HCO	2.60·10 <sup>-9</sup>	"
Insgesamt verwendete Anzahl Reaktionen:	2484	

## 4.7 Die ausgedehnte Formaldehydquelle in der Koma von P/Halley

Aus den äquivalenten Quellenproduktionsraten in Figur 43 gelingt es, mit Hilfe eines analytischen Modelles einerseits die Gasproduktion der ausgedehnten Quelle und andererseits die Kernquellenproduktion herzuleiten. Die folgende Diskussion wird aber auch zeigen, dass die Resultate je nach Regressionsfunktion zum Teil doch signifikant verschieden ausfallen können. In der zweiten Hälfte dieses Kapitels wird möglichen Verursachern der beobachteten, ausgedehnten Formaldehydquelle nachgegangen.

Wir nehmen an, dass die Lebensdauer  $\tau$  für eine bestimmte Sorte neutraler Moleküle als Funktion des radialen Abstandes  $R$  zum Kometenkern konstant sei. Zudem wird vorausgesetzt, dass die untersuchten Moleküle ausschliesslich durch eine Quelle auf dem Kometenkern produziert werden. Unter diesen Randbedingungen leiteten wir unter Kapitel 3.4 die Differentialgleichung (20) her. Darin beschreibt der Ausdruck  $-n(R)/\tau$  die Verlustrate von Teilchen pro Volumen- und Zeiteinheit, bedingt durch die endliche Lebensdauer  $\tau$  gegen Photodestruktion.

Wir schwächen nun die eingangs aufgezählten Bedingungen dahingehend ab, dass auch eine räumlich ausgedehnte, ausserhalb des Kometenkerns aktive Produktionsquelle zugelassen wird. Neben dem Verlustterm  $-n(R)/\tau$  tritt dann auch die lokale Produktionsrate  $q(R)$  [s<sup>-1</sup> cm<sup>-3</sup>] der ausgedehnten Quelle als Produktionsterm in Gleichung (25) auf. Die Differentialgleichung

(20) erhält somit die Form

$$q(R) - \frac{n(R)}{\tau} = \frac{1}{R^2} \cdot \frac{d}{dR} \{n(R)v(R)R^2\} \quad (25)$$

Darin bezeichnen  $n(R)$  die Teilchendichte und  $v(R)$  die Expansionsgeschwindigkeit im Abstand  $R$  zum Kometenkern. Bei einer reinen Kernquelle, d.h.  $q(R) = 0$ , hat (25) die Lösung

$$n(R) = \frac{Q}{4\pi R^2 v_o} \exp\left(-\frac{R}{v_o \tau}\right) \quad (26)$$

, wobei  $\tau = \text{const.}$  und die Expansionsgeschwindigkeit  $v(R) = v_o = \text{const.} = 0.78 \text{ km/s}$  unabhängig von  $R$  ist.  $Q$  steht für die Kernproduktionsrate der untersuchten Spezies. Wenn  $\hat{Y}(R) = Q(\text{untersuchtes Molekül})/Q(\text{H}_2\text{O})$  die äquivalente Kernquellenproduktion in Abhängigkeit des Abstandes  $R$  ist, dann lautet  $n(R)$ :

$$n(R) = \frac{Q(\text{H}_2\text{O}) \cdot \hat{Y}(R)}{4\pi R^2 v_o} \cdot \exp\left(-\frac{R}{v_o \tau}\right) \quad (27)$$

Eingesetzt in Gleichung (25) und aufgelöst nach  $q(R)$  folgt aus (27)

$$q(R) = \frac{Q(\text{H}_2\text{O})}{4\pi R^2} \cdot \frac{d\hat{Y}(R)}{dR} \cdot \exp\left(-\frac{R}{v_o \tau}\right) \quad (28)$$

Eine konstante Lebensdauer  $\tau$  und eine konstante Expansionsgeschwindigkeit  $v_o$  sind nach wie vor Voraussetzung. Wenn wir für  $\tau$  die Lebensdauer von Formaldehyd gegen Photodestruktion einsetzen, und die äquivalente Quellenproduktionsrate von  $\text{H}_2\text{CO}$  eine radiale Funktion der Art

$$\hat{Y}_1(R) = a_o \cdot \exp(a_1 \cdot R) \quad (29)$$

besitzt, dann kann  $q(R)$  analytisch bestimmt werden:

$$q(R) = \frac{a_o a_1 Q(\text{H}_2\text{O})}{4\pi R^2} \cdot \exp\left[R \cdot \left(a_1 - \frac{1}{v_o \tau}\right)\right] \quad (30)$$

Die über die ganze Koma integrierte Produktionsrate  $Q_{\text{ext}}$  aus der ausgedehnten Quelle lässt sich durch Integration sofort berechnen:

$$Q_{\text{ext}} = \int_0^{\infty} 4\pi R^2 q(R) dR = \frac{a_o a_1 Q(\text{H}_2\text{O})}{\frac{1}{v_o \tau} - a_1} \quad \text{falls} \quad \frac{1}{v_o \tau} - a_1 > 0 \quad (31)$$

Wenn für die äquivalente Quellenproduktion statt eines Exponentialansatzes eine lineare Funktion

$$\hat{Y}_2(R) = b_0 + b_1 \cdot R \quad (32)$$

gewählt wird, dann erhalten wir

$$q(R) = \frac{b_1 Q(H_2O)}{4\pi R^2} \cdot \exp\left(-\frac{R}{v_o \tau}\right) \quad \text{und} \quad Q_{ext} = b_1 v_o \tau Q(H_2O) \quad (33)$$

Die Ansätze (29) und (32) ergeben für  $Q_{ext}(H_2CO)$  recht unterschiedliche Resultate (Tabelle 18, Figur 43). Dies hängt damit zusammen, dass die Extrapolation sehr empfindlich auf die Wahl der extrapolierten Anpassungskurve reagiert. Insbesondere sei darauf hingewiesen, dass die lineare Funktion  $\hat{Y}_2(R)$  nicht eine Approximation, d.h. eine vorzeitig abgebrochene Taylorentwicklung der Exponentialfunktion  $\hat{Y}_1(R)$  ist.

**Tabelle 18:** Die räumlich ausgedehnte Formaldehydquelle nach verschiedenen Methoden ausgewertet. Die Kurven sind wie immer auf die in Kapitel 4.9 vorgestellte Gesamtrechnung nachkorrigiert. Betreffend Bezeichnungen sei auf den Text verwiesen.

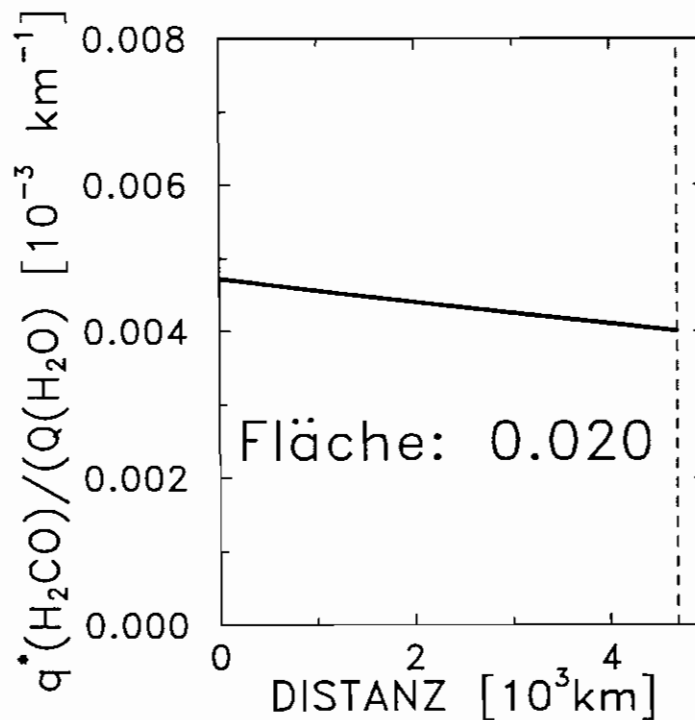
<i>Exponentialfit:</i> $\hat{Y}_1(R[\text{km}])$		Kernquellen- produktion $Q(H_2CO)/Q(H_2O)$	Ausgedehnte Quelle inner- halb der Kavität $Q_{Kav}(H_2CO)/Q(H_2O)$	$\{Q_{Kav}(H_2CO) + Q(H_2CO)\}$	$Q_{ext}$	No.
$a_0$	$a_1$			$Q(H_2O)$	$Q(H_2O)$	
$1.7058 \cdot 10^{-2}$	$2.7684 \cdot 10^{-4}$	1.7%	2.0%	3.7%	13%	1
$1.6972 \cdot 10^{-2}$	$2.2420 \cdot 10^{-4}$	1.7%	1.7%	3.4%	16%	2
$1.9004 \cdot 10^{-2}$	$3.8398 \cdot 10^{-4}$	1.9%	3.0%	4.9%	13%	3
<i>Linearer Fit:</i> $\hat{Y}_2(R[\text{km}])$		Kernquellen- produktion $Q(H_2CO)/Q(H_2O)$	Ausgedehnte Quelle inner- halb der Kavität $Q_{Kav}(H_2CO)/Q(H_2O)$	$\{Q_{Kav}(H_2CO) + Q(H_2CO)\}$	$Q_{ext}$	No.
$b_0$	$b_1$			$Q(H_2O)$	$Q(H_2O)$	
$0.7647 \cdot 10^{-2}$	$1.0884 \cdot 10^{-5}$	0.8%	2.7%	3.5%	3.5%	1
$1.1622 \cdot 10^{-2}$	$0.7429 \cdot 10^{-5}$	0.7%	2.1%	2.8%	3.0%	2
$-0.7410 \cdot 10^{-2}$	$2.3643 \cdot 10^{-5}$	0%	4.7%	4.7%	5.4%	3

Im Kometen P/Halley ist neben der ausgedehnten Formaldehydquelle (Figur 44) auch eine ausgedehnte Kohlenmonoxidquelle beobachtet worden [Woods et al., 1986; Eberhardt et al., 1987b]. In der Literatur wurde verschiedentlich über Mechanismen spekuliert, die zu derartigen, vom Kern abgesetzten Gasquellen führen [Delsemme and Miller, 1970; A'Hearn et al., 1984; Huebner und Boice, 1989]:

Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass der beobachtete unerwartete CO-Anstieg ausserhalb des Kometenkerns darauf zurückzuführen ist, dass die Giotto-Sonde durch einen CO- und  $H_2CO$ -angereicherten, jedoch Wasser-armen Jet flog. Man ist aber heutzutage mehrheitlich geneigt, diese Interpretation zu verwerfen.

Nach *Langevin et al.* [1987] weisen ~30% aller untersuchter Staubpartikel hohe Anteile an leichten Elementen, wie H, C, N und O auf (CHON-Körner). Die Anzahl der CHON-Körner ist ausserdem nahe am Kometenkern prozentual höher als in grossen Entfernungen zum Nukleus. CHON-Staubpartikel, welche infolge der Sonneneinstrahlung verdampfen ("versublimieren"), müssen daher als potentielle Kandidaten für die beobachtete, ausgedehnte Quelle ausserhalb des Kometenkerns in Betracht gezogen werden.

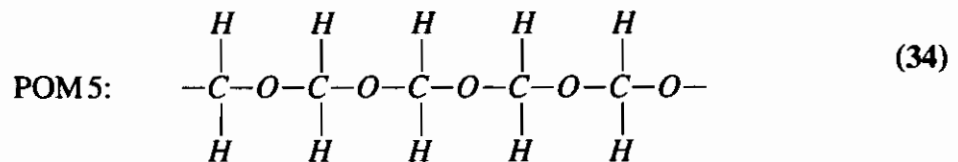
Eiskörner als Alternative zu den Staubpartikeln sind ungeeignet, die ausgedehnte Gasquelle zu begründen. Sie werden bereits in der innersten Koma vollständig vernichtet und überleben kaum mehr als einige 100 km [*A'Hearn und Festou*, 1990].



**Figur 44:** Stärke der räumlich ausgedehnten H<sub>2</sub>CO Quelle in der Koma des Kometen P/Halley (Giotto NMS, M-Analysator Daten).  $q^*$  ist die Produktionsrate in einer 1000 km dicken Kugelschale um den Kern. Aufgezeichnet ist die Auswertung No. 1 mit dem Exponentialfit  $\hat{Y}_1(R)$  (Tabelle 18).

*Huebner* [1987] und *Mitchell et al.* [1987] schlagen Polyoxymethylen (POM) als mögliche Quelle von H<sub>2</sub>CO vor. *Huebner und Boice* [1989] gelingt es mit Staub, der bei einer Abdampfrate von  $3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$  (H<sub>2</sub>CO)<sub>5</sub>-Moleküle in die Koma einleitet, das gemessene radiale CO-Dichteprofil des NMS [*Eberhardt et al.*, 1987b] zu reproduzieren. *Huebner und Boice* nahmen dabei an, dass der Staub insgesamt 4% Polyoxymethylen enthält, wobei ein Kometenkern aus 91% Wasser und 5% CO vorausgesetzt wurde. Aus Polyoxymethylen entsteht als Zwischenprodukt unweigerlich auch Formaldehyd. Polyoxymethylen könnte also möglicherweise die ausgedehnte Quelle von Formaldehyd erklären.

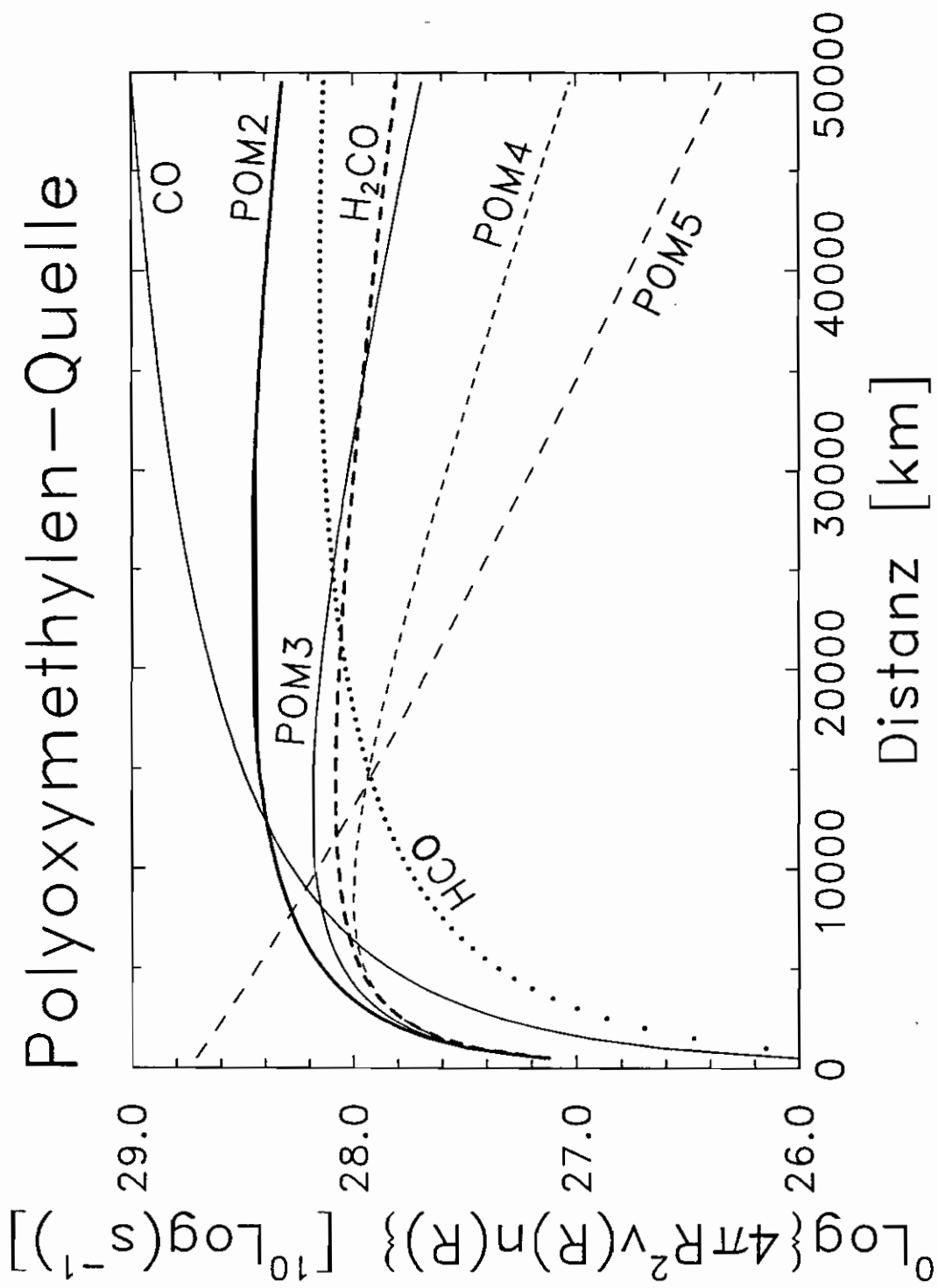
Der Wasser-Ammoniak-Koma aus Kapitel 4.2 wird nun zusätzlich eine POM-Kernquelle dazugefügt, wobei als relative Kernquellenproduktion  $Q(\text{POM5})/(\text{H}_2\text{O}) = 10\%$  angenommen wurde (für andere relative Kernquellenproduktionen können die radialen Dichteprofile in Figur 45 in erster Näherung durch entsprechendes lineares Strecken konstruiert werden). Die oben genannte POM5-Quelle erzeugt in Fünferketten polymerisierte Formaldehydmoleküle (POM5), deren Endstellen ungesättigt, d.h. nicht besetzt sind:



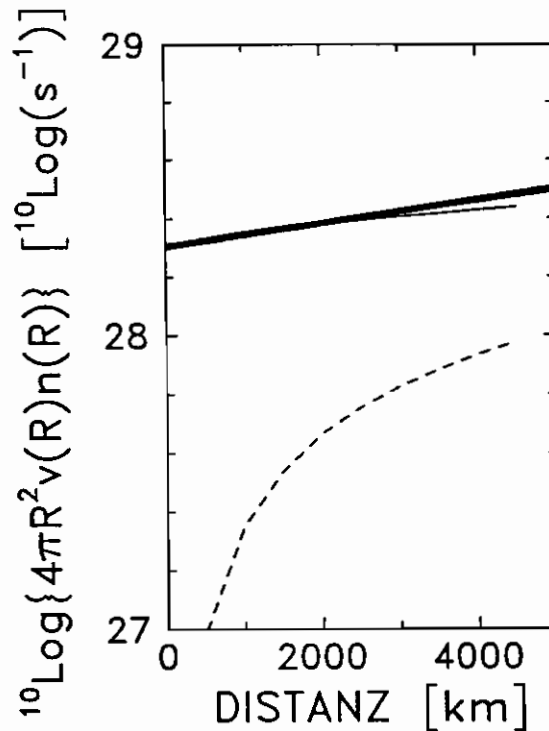
Unter Kapitel 3.3 wurde kurz auf die Polyoxymethylenchemie eingegangen. Insbesondere sind dort auch die geschätzten Reaktionskonstanten beschrieben. Figur 45 verfolgt über eine Distanz von 40'000 km die Neutraldichte der einzelnen Polyoxymethylenketten unterschiedlicher Länge (POM2 - POM5). Von besonderem Interesse sind natürlich die auftretenden Dichten von CO- und H<sub>2</sub>CO-Molekülen, die ebenfalls in der gleichen Figur eingetragen sind. Offenbar entstehen aus den POM5-Molekülen unter der Wirkung der solaren UV-Einstrahlung sehr rasch grosse Mengen an POM2- und leichteren Molekülen wie CO und H<sub>2</sub>CO. Ab ca. 10'000 km ist CO am häufigsten. Die POM-Ketten mittlerer Länge sind bei dieser Distanz bereits deutlich weniger zahlreich als CO- oder POM2-Moleküle. Bemerkenswert ist die ausgeprägte ausgedehnte CO-Quelle, die durch die 10% POM5-Kernproduktion relativ zur Wasserproduktion erzeugt wird.

Wenn die gemessene ausgedehnte CO-Quelle über die Kontaktfläche hinaus einzig mit Photodissoziation aus Formaldehyd begründet werden soll, dann muss die totale Formaldehydproduktionsrate (Kernquelle und ausgedehnte Quelle) mindestens so gross sein wie die der Kohlenmonoxidquelle (Kernquelle und ausgedehnte Quelle). Jedes H<sub>2</sub>CO-Molekül kann nämlich höchstens ein CO-Molekül erzeugen. Innerhalb der Kontaktfläche ist es möglich, das gemessene CO-Dichteradialprofil mit Formaldehyd zu erklären: Wir vergleichen dazu die gemessene CO-Dichte als Funktion des kometozentrischen Abstandes  $R$  mit einer Komasimulationsrechnung. In diesem Komamodell geben wir die Kernquellenproduktionsraten von Kohlenmonoxid und Formaldehyd mit  $Q(\text{CO})/(\text{H}_2\text{O}) = 3.7\%$  und  $Q(\text{H}_2\text{CO})/Q(\text{H}_2\text{O}) = 1.7\%$  vor. Ausserdem verwenden wir die in dieser Arbeit hergeleitete, räumlich ausgedehnte Formaldehydquelle. Wie die Figur 46 zeigt, deckt sich das eben geschilderte, modellierte CO-Dichteradialprofil sehr gut mit dem gemessenen CO-Profil. Erst die Extrapolation über die Kontaktfläche hinaus wird zeigen, ob CO wirklich *ausschliesslich* über Photodissoziation aus H<sub>2</sub>CO produziert wird.





Figur 45: POM-, H<sub>2</sub>CO-, HCO und CO-Häufigkeit als Funktion des Abstandes  $R$  bei einer POM5-Kernquelle mit  $Q(\text{POM5})/(\text{H}_2\text{O}) = 10\%$ .



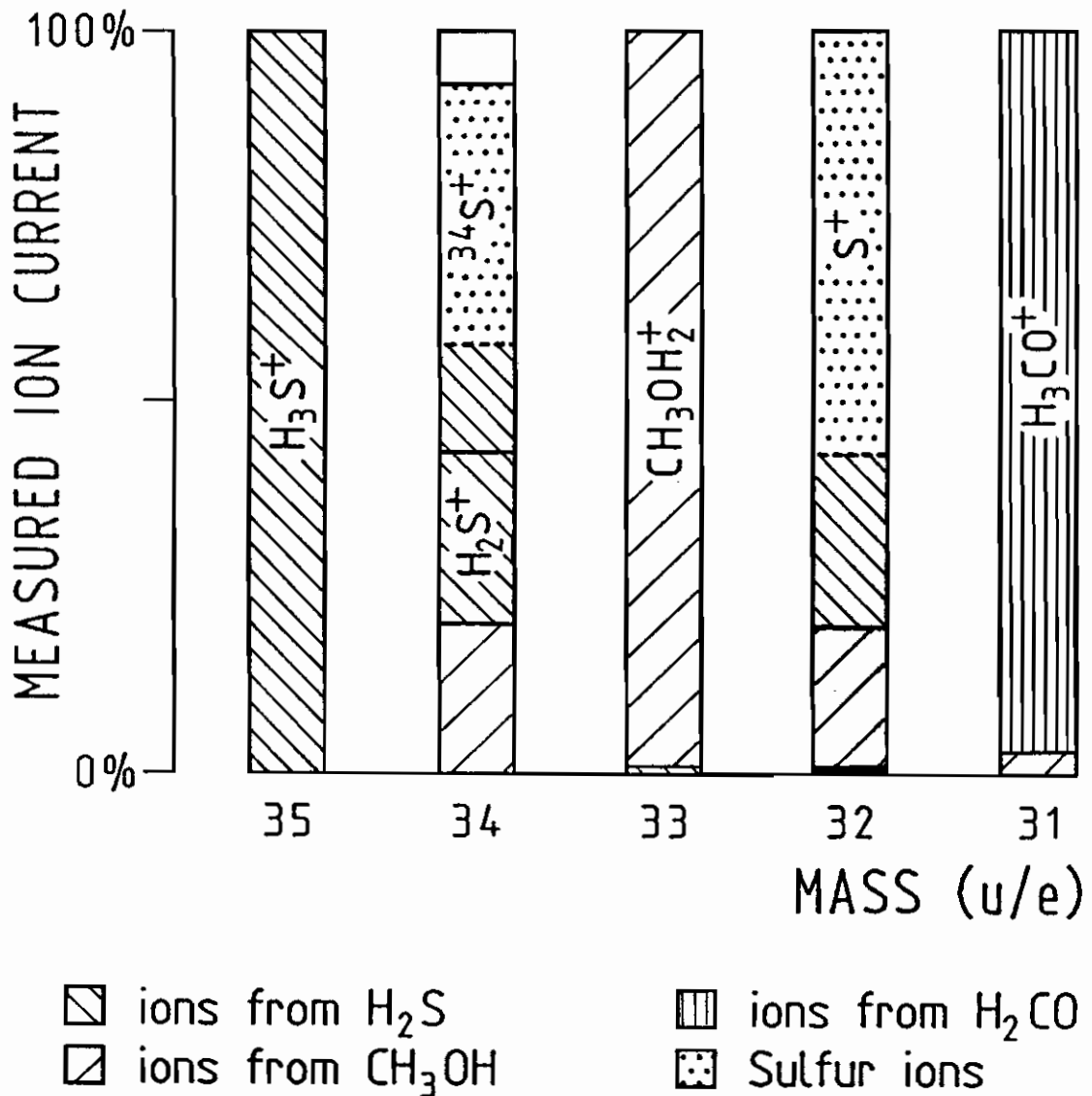
**Figur 46:** Die gemessene CO-Dichte (fette Kurve) im Vergleich mit der modellierten CO-Dichte (dünne, ausgezogene Kurve). Im Modell wurden eine Kohlenmonoxid- und eine Formaldehyd-Kernquelle mit  $Q(\text{CO})/(\text{H}_2\text{O}) = 3.7\%$  respektive  $Q(\text{H}_2\text{CO})/(\text{H}_2\text{O}) = 1.7\%$  verwendet. Ausserdem enthält das Modell die räumlich ausgedehnte H<sub>2</sub>CO-Quelle aus Kapitel 4.9. Die strichlinierte Kurve zeigt das ausschliesslich aus H<sub>2</sub>CO (Kernquelle + ausgedehnte Quelle) erzeugte Kohlenmonoxid. Die totale Kohlenmonoxidichte aus der CO- und H<sub>2</sub>CO-Kernquelle sowie der ausgedehnten H<sub>2</sub>CO-Quelle stellt die dünne, ausgezogene Linie dar.

#### 4.8 Die Masse 34 u/e in den NMS-Ionenspektren des M-Analysators

Unter recht allgemeinen Voraussetzungen kann unsere Interpretation der Massenspektren überprüft werden. In den Ionenspektren entstehen nämlich durch die Vorgabe der Schwefelwasserstoff-, Methanol- und Formaldehyddichte neben den Ionen der Massen 35 u/e, 33 u/e und 31 u/e auch gezwungenermassen Ionen der Masse 34 u/e.

Über Photoionisation erzeugt Schwefelwasserstoff H<sub>2</sub>S<sup>+</sup>-Ionen. Die mit dem Kommodell gerechnete H<sub>2</sub>S<sup>+</sup>-Häufigkeit reicht aber bei weitem nicht aus, die beobachteten Ionen der Masse 34 u/e vollumfänglich zu erklären. Erst wenn die Isotopenbeiträge der Massenlinien 33 u/e und 32 u/e beigezogen werden, gelingt es, die Massenlinie 34 u/e bis auf ca. 90% aufzufüllen (Figur 47). Angenommen werden terrestrische Isotopenverhältnisse, d.h.  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} = 0.011$ ,  $^{17}\text{O}/^{16}\text{O} = 0.00039$ ,  $^{18}\text{O}/^{16}\text{O} = 0.00205$  und  $^{34}\text{S}/^{32}\text{S} = 0.042$ . Auf Grund des Massenkanales 33 u/e kann der Beitrag durch die Isotope  $^{13}\text{CH}_3^{16}\text{OH}_2^+$ ,  $^{12}\text{CDH}_4^{16}\text{O}^+$  und  $^{12}\text{CH}_3^{17}\text{OH}_2^+$  zur Masse 34 u/e bestimmt werden. Analog folgen aus der Masse 32 u/e und aus den Simulationsrechnungen die Beiträge durch die Isotopionen  $^{34}\text{S}^+$  und  $^{12}\text{CH}_3^{18}\text{OH}^+$ . Ionen mit

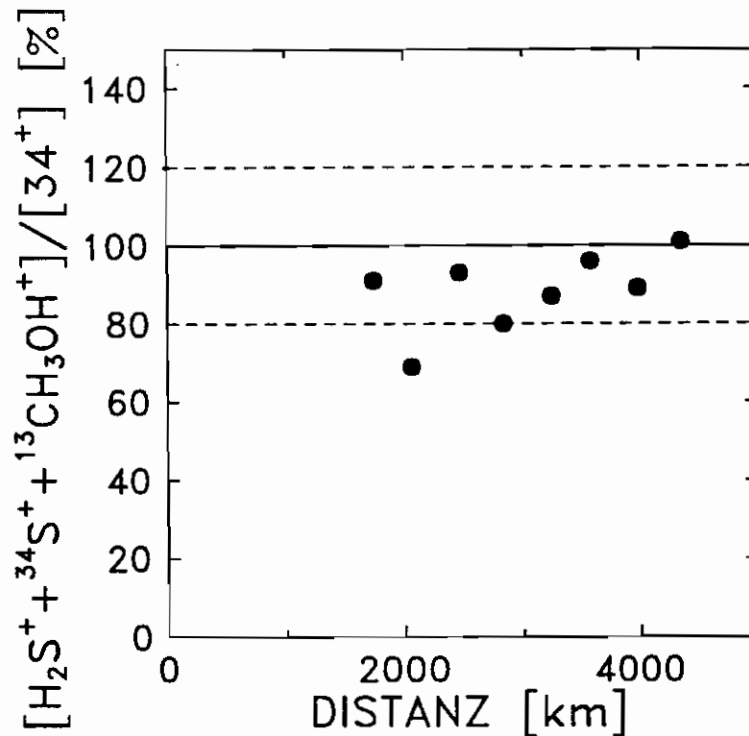
# RELATIVE CONTRIBUTION OF DIFFERENT IONS TO MASSES 31-35 u/e AT 2460km FROM COMET P/HALLEY



**Figur 47:** Ionenspektrum bei  $R = 2460$  km. Die Ionenbeiträge von Schwefelwasserstoff, Methanol und Formaldehyd sind mit verschiedenen Schraffuren gekennzeichnet. Die berechnete Masse 34 u/e basiert auf den Annahmen, dass einerseits die bislang nicht identifizierten Ionen auf der Masse 32 u/e Schwefelionen sind, und andererseits terrestrische Isotopenverhältnisse gelten.

mehreren eingebauten seltenen Isotopen werden in dieser Betrachtung vernachlässigt.

Die Figur 48 vergleicht innerhalb der Kavität die modellierte Ionendichte auf der Masselinie 34 u/e mit den Messdaten. Die variable Zusammensetzung der Masselinien wurde bei der Festlegung der Detektor-Yields berücksichtigt.



**Figur 48:** Die Masse 34 u/e im Vergleich mit den gerechneten Daten aus den Masselinien 33 und 32 u/e. Der Messwert wird jeweils auf 100% gesetzt. Die fetten Kreise stellen die gerechneten Werte dar.

Die Figur 48 zeigt die gute Übereinstimmung zwischen den Messungen einerseits und den Voraussagen auf Grund der Isotopenbeiträge andererseits. Nicht zu übersehen ist der Trend, dass gegen kleiner Abstände  $R$  hin eher mehr Ionen gemessen werden als man aus den Isotopenbeiträgen erwarten würde.

Die Funktionsgleichung der Regressionsgeraden durch die Punkteschar von Figur 48 lautet:  $y = 70.2 + 0.005971 \cdot R[1000 \text{ km}]$  (in Figur 48 ist sie aus Gründen der Übersicht *nicht* eingezeichnet). Über die Ursachen des beobachteten Trends kann beim momentanen Wissensstand nur spekuliert werden:

- (1) Unter Umständen liefert eine bisher nicht berücksichtigte, rasch ablaufende Reaktion zusätzliche Ionenbeiträge zur Masselinie 34 u/e. Denkbar wäre eine exotische Wasserreaktion, bei der geringe Mengen Wasserstoffperoxidionen entstehen ( $\text{H}_2\text{O}_2^+$ , Masse 34 u/e).

- (2) Über die ersten 5000 km verschiebt sich das Verhältnis  $[^{13}\text{CH}_3\text{OH}_2^+]/[34^+]$  von 0.28 bei  $R = 1740$  km auf 0.12 bei  $R = 4350$  km. Angenommen, in Methanol sei das  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhältnis um  $\sim 90\%$  oder das D/H-Verhältnis  $\sim 15\times$  gegenüber dem terrestrischen Verhältnis angereichert, dann könnte das kleine Ionendefizit auf der Masse 34 u/e nahe am Kometenkern ebenfalls gedeckt werden. Wyckoff *et al.* [1989] bestimmten in optischen Spektren von CN ein gegenüber dem terrestrischen  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhältnis um  $\sim 35\%$  angereichertes Verhältnis. Die Autorengruppe um Wyckoff korrigierte aber nachträglich ihr Messresultat [Rettig, 1991]. Ihre letzte Auswertung ergibt nun auch ein terrestrisches  $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ -Verhältnis.

## 4.9 Gesamtrechnung

Die vorliegende Gesamtrechnung berücksichtigt alle bisher aus den NMS-Daten abgeleiteten Einzelresultate. Sämtliche in dieser Gesamtrechnung verwendeten Kernquellen und ausgedehnten Quellen der verschiedenen Spezies fasst Tabelle 19 zusammen.

**Tabelle 19:** Molekülzusammensetzung der Gesamtrechnung bei  $R = 100$  km.

Molekül $A_i$	$Q(A_i)/(H_2O)$ [%]	Ausgedehnte Quelle ?
$H_2O$	100% ( $\Delta n(H_2O) = 5.4 \cdot 10^{29} \text{ cm}^{-3}$ )	nein
CO	3.7%	ja
$CO_2$	3.5%	nein
$H_2CO$	1.7%	ja
$NH_3$	1.5%	nein
$CH_3OH$	0.74%	nein
$(CS_2)$	(-0.7%)	(nein)
$H_2S$	0.40%	nein

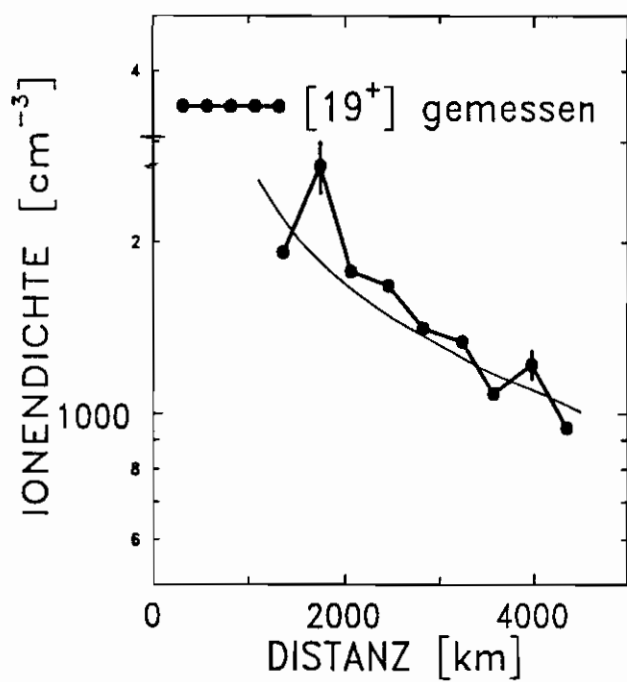
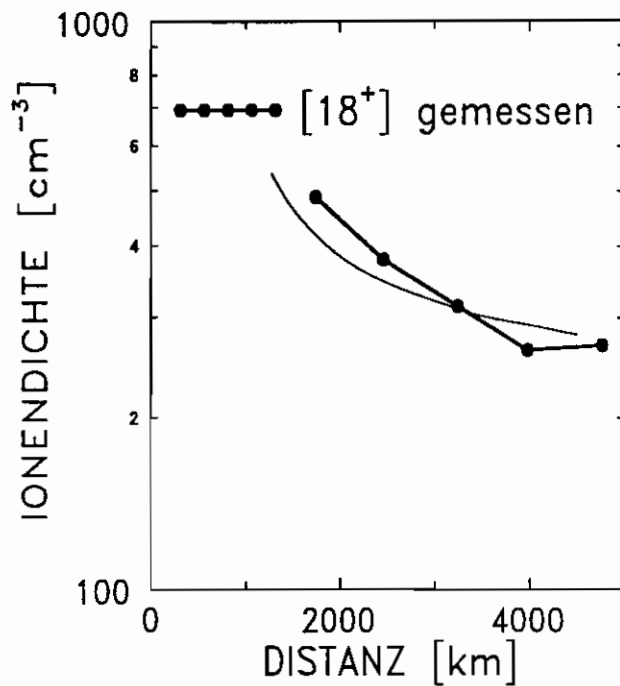
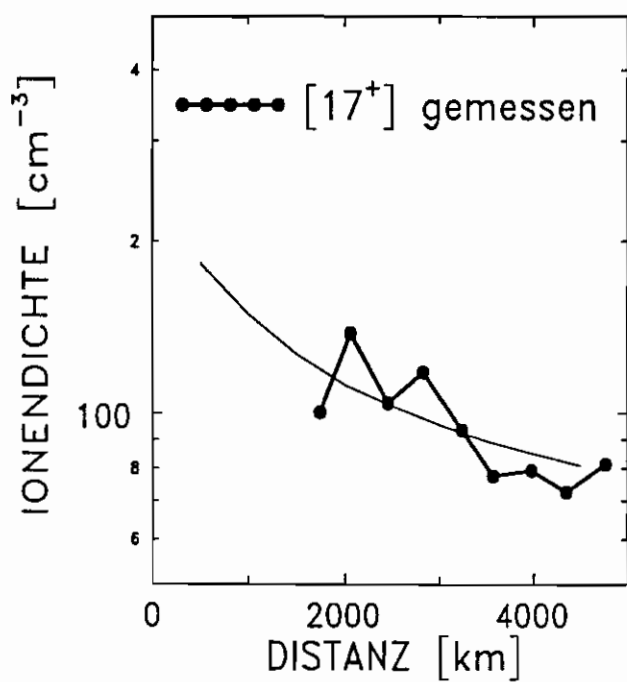
Molekül $A_i$	Ausgedehnte Quelle
CO	CO-Dichte als Funktion des Abstandes $R$ , fest vorgegeben nach dem Ausdruck: $^{10}\log\{4\pi R^2 v(R)n(R)\} = 28.3033 + 3.7729 \cdot 10^{-5} \cdot R[\text{km}]$
$H_2CO$	Ausgedehnte Quelle $q(R)$ in Einheiten von $[\text{cm}^{-3} \text{ s}^{-1}]$ : $q(R) = 2.03 \cdot 10^{18} \cdot R^{-2}[\text{cm}] \cdot \exp(-3.5095 \cdot 10^{-10} \cdot R[\text{cm}])$

Die Tabelle 19 gibt die beim jetzigen Wissensstand optimale Molekülzusammensetzung wieder. Einzig die  $CS_2$ -Quelle gehört nicht zu den bisher durch das NMS nachgewiesenen Molekülen.  $CS_2$  wurde aber dennoch in das Modell einbezogen, weil dadurch der Schwefelbeitrag auf der Masse 32 u/e erhöht werden konnte. Damit konnte sichergestellt werden, dass die bislang fehlenden Schwefelionen auf der Masse 32 u/e die Ionenchemie nicht entscheidend verändern. Die angenommene  $CS_2$ -Häufigkeit führt zu keinen Widersprüchen mit den Daten des E-Analysators. Günstig wirkt sich der Umstand aus, dass der zusätzliche Schwefel aus  $CS_2$  die  $H_3O^+$ -Ionen weniger stark abbaut, als aus der linearen Approximationsmethode zu befürchten war. Reaktionen, die erst in der Gesamtrechnung bedeutsam wurden, sind in Tabelle 20 erwähnt.

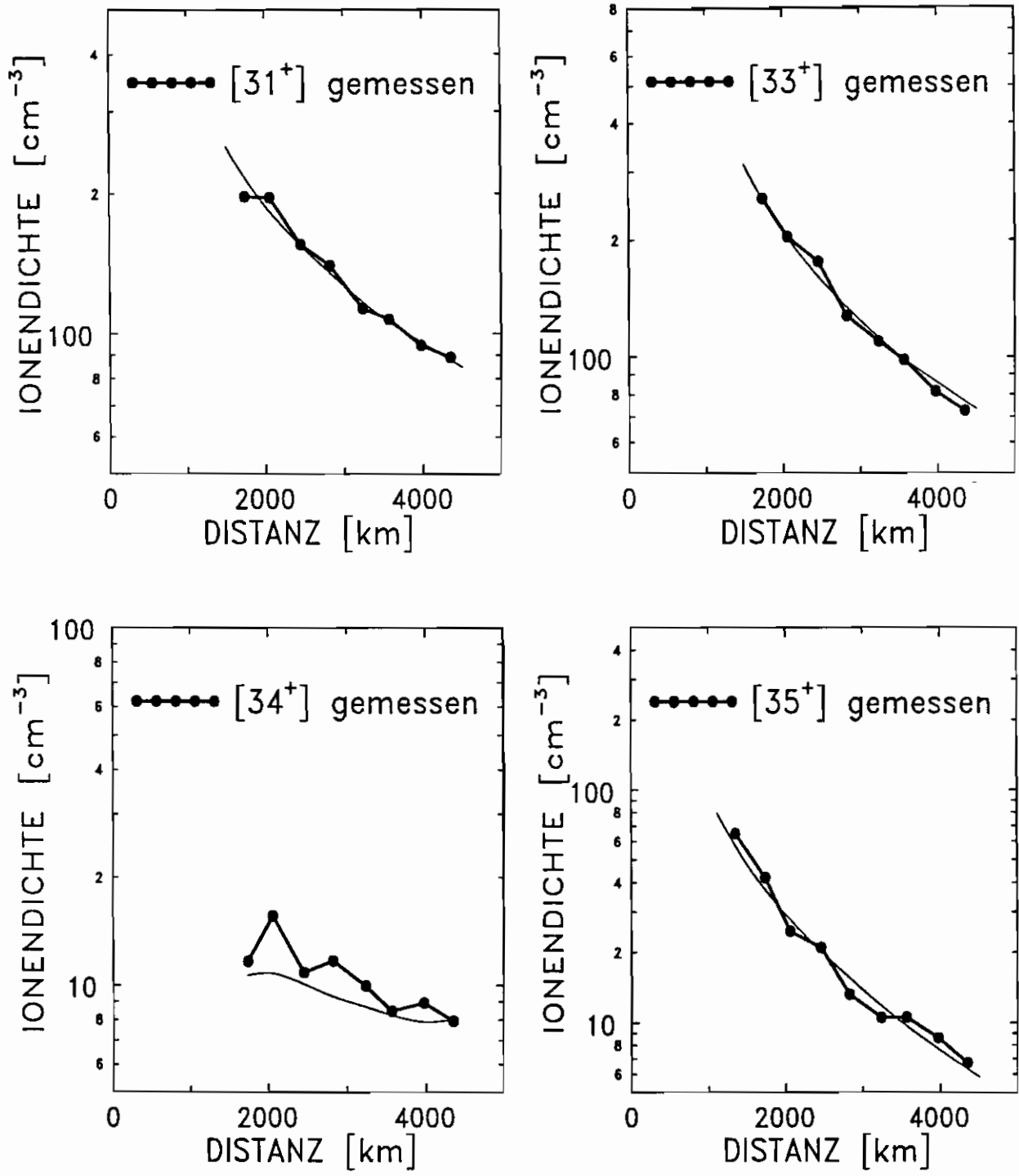
**Tabelle 20:** Wichtige Reaktionen zwischen Ammoniak, Schwefel, Methanol und Formaldehyd, welche die Ionenhäufigkeiten auf den Massen 31-35 u/e beeinflussen.

Reaktion	Reaktionskonstante $k_i$ [ $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ ]	Literaturnachweis
$\text{O}^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{O}$	$4.75 \cdot 10^{-10}$	<i>Millar et al.</i> [1991]
$\text{NH}_2^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}_3\text{CO}$	$3.00 \cdot 10^{-9}$	<i>Anicich und Huntress</i> [1986]
$\text{NH}_2^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{NH}$	$3.00 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{NH}_3^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_3\text{CO}$	$2.20 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{HCO}^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{CO}$	$2.70 \cdot 10^{-9}$	<i>Millar et al.</i> [1991]
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{HCO}$	$2.40 \cdot 10^{-9}$	<i>Anicich und Huntress</i> [1986]
$\text{H}_2\text{CO}^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + \text{H}_3\text{CO}$	$2.40 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_3\text{CO}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$2.30 \cdot 10^{-9}$	<i>Millar et al.</i> [1991]
$\text{H}_3\text{CO}^+ + \text{CH}_3\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$1.90 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_3\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{H}_3\text{S}^+ + \text{H}_2\text{CO}$	$5.00 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{S}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2^+ + \text{HS}$	$7.00 \cdot 10^{-11}$	"
$\text{S}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{S}$	$1.44 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{S}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{HS}$	$6.70 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{S}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2\text{S}^+ + \text{CO}$	$6.70 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{HS}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{HS}$	$5.25 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{HS}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{S}$	$9.75 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{H}_2\text{S}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{HS}$	$1.36 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_2\text{S}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_3^+ + \text{H}_2\text{S}$	$3.40 \cdot 10^{-10}$	"
$\text{H}_3\text{S}^+ + \text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_4^+ + \text{H}_2\text{S}$	$1.90 \cdot 10^{-9}$	"
$\text{H}_3\text{S}^+ + \text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_3\text{CO}^+ + \text{H}_2\text{S}$	$2.20 \cdot 10^{-9}$	"

Die folgenden Figuren vergleichen die modellierten Ionendichten der Massen 17, 18, 19, 31, 33, 34 und 35 u/e mit den Messdaten (Figur 49). Die Figur 50 zeigt die simulierten Ionenspektren bei zwei Distanzen im Vergleich mit den Messungen.

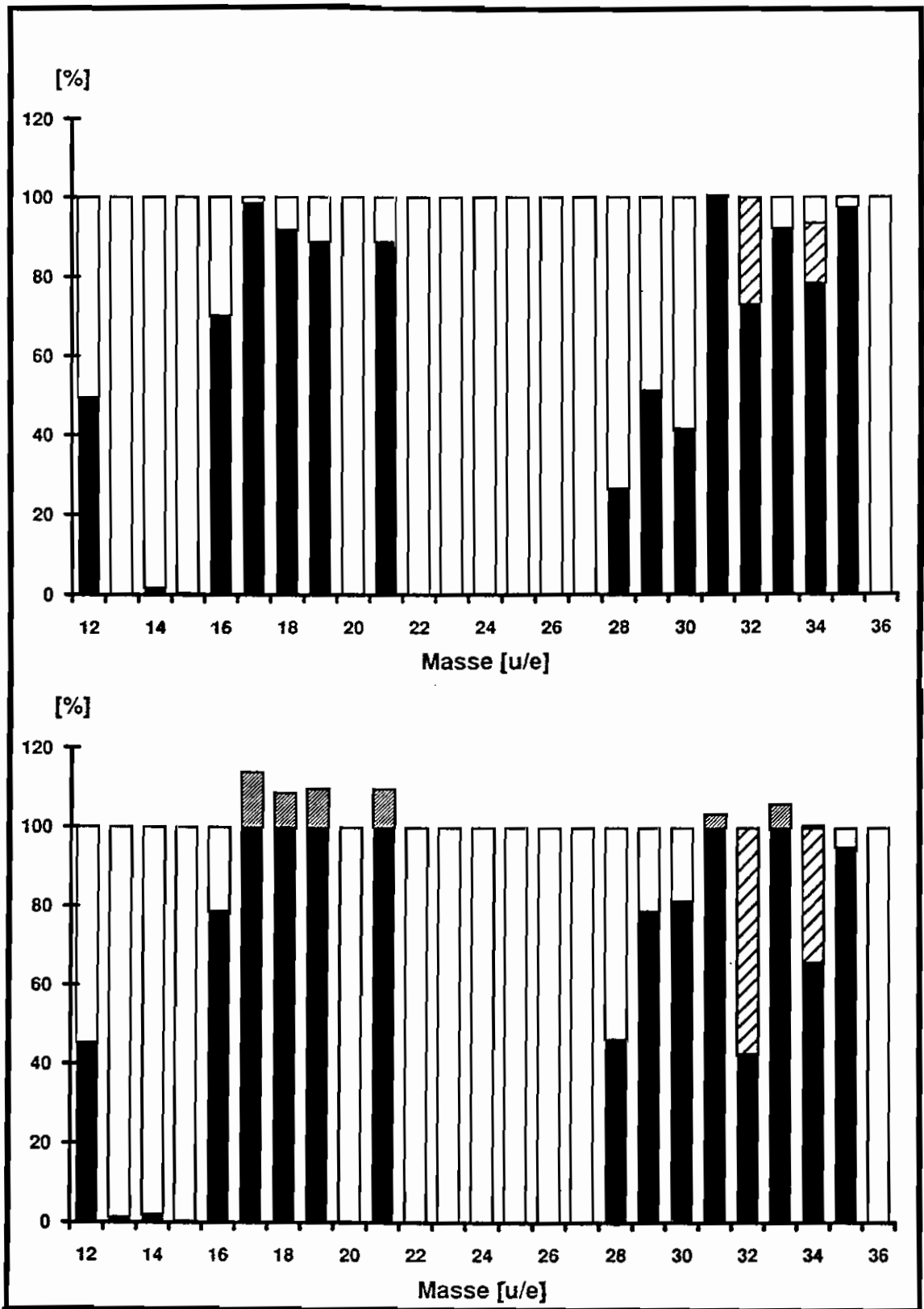


(Figur 49)



**Figur 49:** Die gerechneten Ionendichten auf den Massen 17, 18, 19, 31, 33, 34 und 35 u/e im Vergleich mit den Messungen. Bei der Berechnung der Ionendichte auf der Masse 34 u/e wurde angenommen, dass das fehlende Signal auf der Masse 32 u/e durch  $S^+$ -Ionen erzeugt wird.





Figur 50: Mit den Anfangsbedingungen aus Tabelle 19 generiertes Ionenspektrum im Vergleich mit den Messungen. Der gemessene Wert entspricht 100%. Auf der Masselinie 32 u/e wird die Signaldifferenz zwischen der Messung und dem Modell mit S<sup>+</sup>-Ionen aufgefüllt. Diese S<sup>+</sup>-Ionen (inkl. Isotopionen <sup>34</sup>S<sup>+</sup>) sind in den Figuren *fett* schraffiert dargestellt. Die obere Figur zeigt das Spektrum bei 2460 km, die untere dasjenige bei 4350 km.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Kapitel 4 fehlt bewusst eine Fehlerdiskussion, die hier zusammenfassend kurz angeschnitten werden soll. Abschliessend folgen noch einige Kommentare zum möglichen Fortgang in der Datenauswertung.

Die Fehler auf Grund der Ionenstatistik sind im hier untersuchten Distanz- und Massenbereich in der Mehrzahl aller Fälle verschwindend klein (in der Figur 49 verdecken die Datenpunkte meistens die Fehlerbalken). Die in allen Messdaten beobachtete Feinstruktur, d.h. die Streuung der Datenpunkte um glatte Kurven, ist unter Umständen auch ein Instrumenteneffekt. Es ist auch denkbar, dass lokale Dichteveränderungen sowie durch das Modell nicht wiedergegebene, kurzfristige Prozesse derartige Schwankungen hervorrufen. Limitierend für die Genauigkeit der Aussagen unter Kapitel 4 sind aber nicht in erster Linie die Messdaten selbst, sondern das Kommodell. Insbesondere beschränken die im Modell vorkommenden Photoreaktionskonstanten, welche zum Teil mit recht grossen Unsicherheiten behaftet sind, die Aussagekraft des Modelles. Die geschätzten Fehlerschranken zu den relativen Produktionsraten von Ammoniak, Schwefelwasserstoff, Methanol und Formaldehyd sind in Tabelle 21 zusammengefasst. Abgesehen von Ammoniak fügen sich die vorliegenden Resultate recht gut in die Ergebnisse anderer Gruppen ein (Tabelle 22).

**Tabelle 21:** In dieser Arbeit neu hergeleitete relative Produktionsraten  $Q(A)/Q(H_2O)$  inklusive geschätzte Fehlerschranken.

Molekül	Kernquellenproduktion	Ausgedehnte Quelle	
Ammoniak	$Q(NH_3)/Q(H_2O) = (15 \pm 5)\%$	- keine Hinweise	
Formaldehyd	$Q(H_2CO)/Q(H_2O) = \left( 17 \begin{matrix} +8 \\ -12 \end{matrix} \right)\%$	$\left( 35 \begin{matrix} +3 \\ -8 \end{matrix} \right)\%$ <sup>1)</sup>	Ausgedehnte Quelle + Kernquelle innerhalb
Methanol	$Q(CH_3OH)/Q(H_2O) = (7.4 \pm 1.5)\%$	- keine ausgedehnte Quelle innerhalb der Kontaktfläche	
Schwefelwasserstoff	$Q(H_2S)/Q(H_2O) = (4.0 \pm 1.5)\%$	- wahrscheinlich innerhalb der Kontaktfläche nur Kernquelle	

<sup>1)</sup> Kernquelle und ausgedehnte Quelle innerhalb der Kavität

Das weitere Vorgehen bei der Datenauswertung ist eigentlich im Abschnitt 4.1, "Strategie der Auswertung", dargelegt worden. Mit der jetzt bekannten Molekülzusammensetzung der Koma können ~80% der ionisierten Spezies erklärt werden. Die "1%-Methode" erlaubt zuverlässige Voraussagen bei verhältnismässig geringem Aufwand. Zu den verbleibenden S<sup>+</sup>-Ionen der Masselinie 32 u/e, die nicht aus Schwefelwasserstoff stammen, können nur durch Vergleich mit den Ionendaten des E-Analysators zusammen mit den Neutraldaten die zugehörigen neutralen Moleküle identifiziert werden. Der Massenbereich des E-Analysators erstreckt sich im Ionenmodus bis zur Masse 56 u/e. In den Ionenspektren des E-Analysators sind deshalb insbesondere auch die Ionen CS<sup>+</sup>, HCS<sup>+</sup>, H<sub>2</sub>CS<sup>+</sup>, NS<sup>+</sup>, H<sub>3</sub>CS<sup>+</sup>, HNS<sup>+</sup>, SO<sup>+</sup>, HSO<sup>+</sup> und C<sub>2</sub>S<sup>+</sup>

sichtbar. Aus den Ionendaten zusammen mit der 1%-Methode sollte es weiter möglich sein, für die C<sub>2</sub>-, HCN-, C<sub>3</sub>- und C<sub>2</sub>H<sub>x</sub>-Moleküle (x = 2, 4, 6) mindestens eine obere Grenze für die Kernproduktionsrate anzugeben. Relativ schwierig gestaltet sich eine präzise Bestimmung der CH<sub>4</sub>-Produktionsrate. In den Ionenspektren bestehen auf der Masselinie 16 u/e Interferenzen mit NH<sub>2</sub><sup>+</sup> aus Ammoniak sowie O<sup>+</sup>-Ionen, welche überwiegend aus Wasser gebildet werden. Die CH<sub>4</sub><sup>+</sup>-Häufigkeit ändert nicht übermäßig stark als Funktion der vorgegebenen Methan-Kernproduktionsrate, womit die 16 u/e-Masselinie in den Ionenspektren kein besonders empfindlicher Indikator für die CH<sub>4</sub>-Dichte ist. Erfolgsversprechender ist daher die Methanbestimmung aus den Neutraldaten, wobei auch dort auf der Masselinie 16 u/e neutraler Sauerstoff aus H<sub>2</sub>O und neutrale NH<sub>2</sub>-Moleküle aus Ammoniak stark vertreten sein werden. Bei nun bekannter NH<sub>3</sub>- und H<sub>2</sub>O-Kernproduktion kann die NH<sub>2</sub>- und O-Teilchendichte mit dem Komamodell berechnet werden. Auf Grund von Literaturwerten lassen sich die Fragmentierungsverhältnisse von Wasser und Ammoniak durch Elektronenstoss abschätzen. Erst die konkrete Datenauswertung wird aber zeigen, ob die Genauigkeit ausreicht, sinnvolle Aussagen zur Methanhäufigkeit zu machen.

**Tabelle 22:** Vergleich mit anderen Messungen. Neben Daten von P/Halley wurden auch Messresultate von anderen Kometen beigezogen.

Komet	Kernproduktionsrate $Q(A_i)/Q(H_2O)$ [‰]				Literaturquelle
	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> CO	CH <sub>3</sub> OH	H <sub>2</sub> S	
P/Halley	15	35 <sup>1)</sup>	7.4	4.0	Giotto NMS, vorliegende Arbeit
	10-20				Giotto IMS, <i>Allen et al.</i> [1987]
		<sup>2)</sup>	3-15	1-4	Giotto IMS, <i>Geiss et al.</i> [1991]
	4				Fabry-Perot Interferometrie, <i>Magge-Saur et al.</i> [1989]
	2				optisch, sichtbar und nahes IR, <i>Wyckoff et al.</i> [1991]
		45		Vega, IKS, IR, <i>Combes et al.</i> [1988], <i>Mumma und Reuter</i> [1989]	
		15		VLA Teleskop, <i>Snyder et al.</i> [1989]	
Brorsen-Metcalf		4.4			IRAM Radioteleskop, <i>Colom et al.</i> [1991]
Austin		1.1	12	2.7	IRAM Radioteleskop, <i>Colom et al.</i> [1991]
Levy		0.4	7.2	2.0	IRAM Radioteleskop, <i>Colom et al.</i> [1991]

<sup>1)</sup> Kernquelle und ausgedehnte Quelle innerhalb der Kontaktfläche

<sup>2)</sup> -10‰ bei 1500 km und einige Prozente bis zur Ionopause (Kern- und ausgedehnte Quelle aufintegriert)

## 6 Literaturverzeichnis

- A'Hearn M.F., Schleicher D.G., Feldman P.D., Millis R.L., and Thompson D.T., Comet  
Bowell 1980b, *Astron. J.* **89**, 579-591, 1984
- A'Hearn M.F., Hoban S., Birch P.V., Bowers C., Martin R., and Klinglesmith III D.A.,  
Gaseous jets in Comet Halley, *Nature* **324**, 649-651, 1986
- A'Hearn M.F., and Festou M.C., The neutral coma, in *Physics and Chemistry of Comets*,  
editor Huebner W.F., Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris,  
Tokyo, Hong Kong, Barcelona, 67-112, 1990
- Allen M., Delitsky M., Huntress W., Young Y., Ip W.-H., Schwenn R., Rosenbauer H., Shelly  
E., Balsiger H., and Geiss J., Evidence for methane and ammonia in the coma of comet  
P/Halley, *Astron. Astrophys.* **187**, 502-512, 1987
- Anders E., and Grevesse N., Abundances of the elements: Meteoritic and solar, *Geochimica  
et Cosmochimica Acta* **53**, 197-214, 1989
- Anicich V.G., and Huntress W.T., A Survey of Bimolecular Ion-Molecule Reactions for Use  
in Modeling the Chemistry of Planetary Atmospheres, Cometary Comae, and Interstellar  
Clouds, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **62**, 553-672, 1986
- Bailey M.E., Clube S.V.M., and Napier W.M., *The Origin of Comets* (book), Pergamon Press,  
1<sup>st</sup> edition, Oxford, 1990
- Barrington A.E., Aerospace Measurement Techniques, *NASA SP-132*, 43-72, 1967
- Barth C.G., Iobiska W.K., Rottmann G.J., and White O.R., Comparison of 10.7 cm Radio  
Flux with SME Solar Lyman Alpha Flux, *Geophys. Res. Lett.* **17**, 571-574, 1990
- Bass A.M., Glasgow L.C., Miller C., Jesson J.P., and Filkin D.L., Temperature dependent  
absorption cross sections for formaldehyde (CH<sub>2</sub>O): The effect of formaldehyde on  
stratospheric chlorine chemistry, *Planetary Space Science* **28**, 675-679, 1980
- Biermann L., Kometenschweife und solare Korpuskularstrahlung, *Z. Astrophys.* **29**, 274-286,  
1951
- Bockelée-Morvan D., Crovisier J., Colom P., Despois D., and Paubert G., Observations of  
parent molecules in comets P/Brorsen-Metcalf (1989o), Austin (1989c1) und Levy (1990c)  
at millimetre wavelengths: HCN, H<sub>2</sub>S, H<sub>2</sub>CO and CH<sub>3</sub>OH, *Proceedings of 24th ESLAB  
Symposium, ESA SP-315*, 1990

- Boice D.C., private communication, DPS-meeting, Palo Alto, November 1991
- Bratschi O., Entwicklung einer automatischen Steuerung für die Weltraum-Massenspektrometer-Eichkammer, *Lizentiatsarbeit*, Universität Bern, 1988
- Beuhler R.J., and Friedman L., Low Noise, High Voltage Secondary Emission Ion Detector for Polyatomic Ions, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys.* **23**, 81-97, 1977a
- Beuhler R.J., and Friedman L., A model of secondary electron yields from atomic and polyatomic ion impacts on copper and tungsten surfaces based upon stopping-power calculations, *J. Appl. Phys.* **48(9)**, 3928-3936, 1977b
- Beuhler R.J., and Friedman L., Threshold Studies of Secondary Electron Emission Induced by Macro-Ion Impact on Solid Surfaces, *Nucl. Instr. and Meth.* **170**, 309-315, 1980
- Beuhler R.J., A comparison of secondary electron yields from accelerated water cluster ions ( $M/z < 50'000$ ) striking  $Al_2O_3$  and copper surfaces, *J. Appl. Phys.* **54(7)**, 4118-4126, 1983
- Cadetg L., Auswertung von Daten des Giotto-Neutralgasmassenspektrometers des Vorbeifluges am Kometen Halley: Bestimmung des Instrumentenuntergrundes und Ableitung des atomaren Sauerstoff-Kohlenstoff-Verhältnisses in der Koma bei grosser Entfernung vom Kometenkern, *Lizentiatsarbeit*, Universität Bern, 1989
- Cadetg L., Transmission des M-Analysators des Giotto NMS, internes Memorandum, 28. Mai 1990
- Calverts J.G., and Pitts J.N. Jr., *Photochemistry* (book), John Wiley & Sons Inc., New York, 1966
- Chyba C.F., Sources of organic material for the origin of life on Earth, invited paper at the *23rd Annual Meeting of the Division for Planetary Sciences of the Astronomical Society*, Palo Alto, California, November 4 - 8, 1991
- Cravens T.E., A magnetohydrodynamical Model of The Inner Coma of Comet Halley, *J. Geophys. Res.* **94**, 11A, 15025-15040, 1989
- Crifo J.F., Water Clusters in the coma of Comet Halley and Their Effect on the Gas Density, Temperature, and Velocity, *Icarus* **84**, 414-446, 1990
- Crifo J.F., and Slanina Z., The formation and role of water dimer in a cometary atmosphere, with application to comet P/Halley, *Astrophys. J.* **383**, 351-355, 1991
- Crovisier J., The photodissociation of water in cometary atmospheres, *Astron. Astrophys.* **213**, 459-464, 1989

- Colom P., Despois D., Pauben G., Bockelée-Morvan D., and Crovisier J., Observations of cometary parent molecules with the IRAM radio telescope, *Proceedings of the International conference on Asteroids, Comets, Meteors 1991*, Edts. Lunar and Planetary Institute (Houston), Flagstaff, Arizona (USA), June 24-28, preprint, 1991
- Combes M., Moraz V.I., Crovisier J., Encrenaz T., Bibring J.-P., Grigoriev A.V., Sanko N.F., Coron N., Crifo J.F., Gispert R., Bockelée-Morvan D., Nikolsky Yu.V., Krasnopolsky V.A., Owen T., Ernerich C., Lamarre Z.M., and Rocard F., The 2.5 - 12  $\mu\text{m}$  spectrum of comet Halley from the IKS-VEGA experiment, *Icarus* **76**, 404-436, 1988
- Crifo J.F., Cometary gas phase chemistry taking into account homogeneous and ion-induced water recondensation, submitted paper, to be published in *Icarus*, 1991
- Delsemme A.H., et Swings P., Hydrates de gaz dans les noyaux cométaires et les grains interstellaires, *Ann. d'Astrophys.* **15**, 1-6, 1952
- Delsemme A.H., and Miller D.C., Physico-chemical phenomena in comets - II. Gas adsorption in the snow of the nucleus, *Planet. Space Sci.* **18**, 717-730, 1970
- Delsemme A.H., Nature and history of the organic compounds in comets: An astrophysical view, in *Comets in the Post-Halley Era, Volume I*, eds. Newburn R.L. Jr., Neugebauer M., and Rahe J., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 1989
- Dolder U., Der Massenanalysator des Neutralgasmassenspektrometers GIOTTO-NMS: Eichungen und erste Ergebnisse, *Dissertation*, Universität Bern, 1986
- Eberhardt P., Memorandum **me5784a**, July 6, 1984
- Eberhardt P., Dolder U., Schulte W., Krankowsky D., Lämmerzahl P., Hoffman J.H., Hodges R.R., Berthelier J.J., and Illiano J.M., The D/H ratio in water from comet P/Halley, *Astron. Astrophys.* **187**, 435-437, 1987a
- Eberhardt P., Krankowsky D., Schulte W., Dolder U., Lämmerzahl P., Berthelier J.J., Woveries J., Stubbemann U., Hodges R.R., Hoffman J.H., and Illiano J.M., The CO and N<sub>2</sub> abundance in comet P/Halley, *Astron. Astrophys.* **187**, 481-484, 1987b
- Eberhardt P., pers. Mitteilung, 1991
- Ferguson M.M., Ioneninduzierte kinetische Elektronenemission an reinen und gasbedeckten Metalloberflächen, *Berichte der Kernforschungsanlage Jülich 2201*, Institut für Grenzflächenforschung und Vakuumphysik (überarbeitete Version der gleichlautenden Dissertation an der Technischen Universität Wien, November 1987), Jülich, 1988
- Firsov O.B., *Sov. Phys.* **9**, 308ff, 1959

- Geiss J., Altwegg K., Anders E., Balsiger H., Ip W.-H., Meier A., Neugebauer M., Rosenbauer H., and Shelley E.G., Interpretation of the ion mass spectra in the mass range 25-35 obtained in the inner coma of Halley's comet by the HIS-sensor of the Giotto IMS experiment, *Astron. Astrophys.* **247**, 226-234, 1991
- Ghielmetti A.G., Balsiger H., Bänninger R., Eberhardt P., Geiss J., and Young D.T., Calibration system for satellite and rocket born ion mass spectrometers in the energy range from 5 eV/charge to 100 keV/charge, *Rev. Sci. Instrum.* **54(4)**, 425-436, 1983
- Goldhaber D.M., and Betz A.L., Silane in IRC +10216, *Astrophys. J.* **279**, L55-L58, 1984
- Gombosi T.I., Nagy A.F., and Cravens T.E., Dust and Neutral Gas Modeling of the Inner Atmosphere of Comets, *Rev. Geophysics* **24(3)**, 667-700, 1986
- Gomet J.-C., et Kästler A., Physique Moléculaire - Détermination expérimentale des sections efficaces absolues partielles d'ionisation de l'eau et de l'ammoniac par impact électronique, *C.R. Acad. Sc. Paris* **B281**, 627-630, 1975
- Hagstrum H., Theory of Auger Ejection of Electrons from Metals by Ions, *Phys. Rev.* **69**, 336-365, 1954
- Hasselkamp D., Die ioneninduzierte kinetische Elektronenemission von Metallen bei mittleren und grossen Projektilenergien, *Habilitationsschrift*, Justus-Liebig-Universität Giessen, 1985
- Huebner W.F., and Carpenter C.W., Los Alamos Informal Report, *LA-8085-MS*, 1979
- Huebner W.F., First polymer in space identified in Comet Halley, *Science* **237**, 628-630, 1987
- Huebner W.F., Boice D.C., Sharp C.M., Korth A., Lin R.P., Mitchell D.L., and Reme H., Evidence for first polymer in comet Halley: Polyoxymethylene, *ESA SP-278*, 163-167, 1987
- Huebner W.F., and Boice D.C., Polymers in comet comae, in *Solar System Plasma Physics*, eds. Waite J.H. Jr., Burch J.L., and Moore R.L., AGU Monograph **54**, 453-456, 1989
- Huebner W.F., Keady J.J., and Lyon S.P., Solar Photorates for Planetary Atmospheres and Atmospheric Pollutants, preprint, 1989
- Huebner W.F., Keady J.J., and Lyon S.P., private communication, 1991
- Huebner W.F., Fax vom 24. Oktober 1991
- Ip W.-H., and Axford W.I., The Plasma, in *Physics and Chemistry of Comets*, 177-233, editor Huebner W.F., Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, 1990

- Keller H.U., The Nucleus, in *Physics and Chemistry of Comets*, 13-68, edited by Huebner W.F., Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London, Paris, Tokyo, Hong Kong, Barcelona, 1990
- Kishinevskii L.M., *Rad. Eff.* **19**, 23, Section 2, 1973
- Kitamura Y., Axisymmetric dusty gas jet in the inner coma of a comet. II. The case of isolated jets, *Icarus* **72**, 555-567, 1987
- Kömle N.I., and Ip W.-H., Anisotropic non-stationary gas flow dynamics in the coma of comet P/Halley, *Astron. Astrophys.* **187**, 405-410, 1987
- Körösmezey A., Cravens T.E., Gombosi T.I., Nagy A.F., Mendis D.A., Szegő K., Gribov B.E., Shapiro V.D., Schevchenko V.I., *20th ESLAB Symp., ESA SP-250 Vol. I*, 235ff, 1986
- Körösmezey A., Cravens T.E., Gombosi T.I., Nagy A.F., Mendis D.A., Szegő K., Gribov B.E., Sagdeev R.Z., Shapiro U.D., and Shevchenko V.I., *J. Geophys. Res.* **92**, 7331-7340, 1987
- Krankowsky D., Lämmerzahl P., Dörflinger D., Herrwerth I., Stubbemann U., Woveries J., Eberhardt P., Dolder U., Fischer J., Herrmann U., Hofstetter H., Junck M., Meier F.O., Schulte W., Berthelier J.J., Illiano J.M., Godefroy M., Gogly G., Thevenet P., Hoffman J.H., Hodges R.R., and Wright W.W., The GIOTTO Neutral Mass Spectrometer, *ESA SP-1077*, 109-128, 1986a
- Krankowsky D., Lämmerzahl P., Herrwerth I., Woveries J., Eberhardt P., Dolder U., Herrmann U., Schulte W., Berthelier J.J., Illiano J.M., Hodges R.R., and Hoffman J.H., In situ gas and ion measurements at comet Halley, *Nature* **321**, 326-329, 1986b
- Krankowsky D., and Eberhardt P., Evidence for the Composition of Ices in the Nucleus of Comet P/Halley, in *Comet Halley 1986, World-Wide Investigations, Results and Interpretations*, edited by Mason J.W., Ellis Horwood Limited, Chichester, England, 273-287, 1989
- Lämmerzahl P., Krankowsky D., Hodges R.R., Stubbemann U., Woveries J., Herrwerth I., Berthelier J.J., Illiano J.M., Eberhardt P., Dolder U., Schulte W., and Hoffmann J. H., Expansion velocity and temperatures of gas and ions measured in the coma of comet P/Halley, *Astron. Astrophys.* **187**, 169-173, 1987
- Lampe F.W., Franklin J.L., and Field F.H., Cross Sections for Ionization by Electrons, *J. Am. Chem. Soc.* **79**, 6129-6132, 1957
- Langevin Y., Kissel J., Bertaux J.-L., and Chassefière E., First statistical analysis of 5000 mass spectra of cometary grains obtained by PUMA 1 (Vega 1) and Pia (Giotto) impact ionization mass spectrometers in the compressed modes, *Astron. Astrophys.* **187**, 761-766, 1987



- Lee L.C., Wang X., and Suto M., Quantitative Photoabsorption and fluorescence spectroscopy of H<sub>2</sub>S and D<sub>2</sub>S at 49 - 240 nm, *J. Chem. Phys.* **86**, 4352-4361, 1987
- Mann M.M., Hustrulid A., and Tate J.T., The Ionization and Dissociation of Water Vapor and Ammonia by Electron Impact, *Phys. Rev.* **58**, 340-347, 1940
- Märk T.D., and Egger F., Cross-Section for Single Ionization of H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O by Electron Impact from Threshold up to 170 eV, *Int. J. Mass Spectrom. & Ion Physics* **20**, 89-99, 1976
- Magee-Saur K., Scherb F., Roesler F.L., Harlander J., and Lutz B.L., Fabry-Perot observations of the NH<sub>2</sub> emission from Comet Halley, *Icarus* **82**, 50-60, 1989
- Marconi M.L., and Mendis D.A., The Atmosphere of a Dirty-Clathrate Cometary Nucleus: A Two-Phase, Multifluid Model, *Astrophys. J.* **273**, 381-396, 1983
- Marconi M.L., and Mendis D.A., The effects of the diffuse radiation fields due to multiple scattering and thermal reradiation by dust on the dynamics and thermodynamics of a dusty cometary atmosphere, *Astrophys. J.* **287**, 445-454, 1984
- Marconi M.L., and Mendis D.A., Infrared Heating of Comet P/Halley's Atmosphere, *Earth, Moon and Planets* **36**, 249-256, 1986
- Marconi M.L., and Mendis D.A., On the Ammonia Abundance in the Coma of Halley's Comet, *The Astrophys. J.* **330**, 513-517, 1988
- Marconi M.L., Mendis D.A., Korth A., Lin R.P., Mitchell D.L., and Reme H., The Identification of H<sub>3</sub>S<sup>+</sup> with the Ion of Mass per Charge (m/q) 35 Observed in the Coma of Comet P/Halley, *The Astrophys. J.* **352**, L17-L20, 1990
- McDonnell J.A.M., Alexander W.M., Burton W.M., Bussoletti E., Evans G.C., Evans S.T., Firth J.G., Grard R.J.L., Green S.F., Grün E., Hanner M.S., Hughes D.W., Igenbergs E., Kissel J., Kuczera H., Lindblad B.A., Langevin Y., Mandeville J.-C., Nappo S., Pankiewicz G.S.A., Perry C.H., Schwehm G.H., Sekanina Z., Stevenson T.J., Turner R.F., Weishaupt U., Wallis M.K., and Zrnecki J.C., The dust distribution within the inner coma of comet P/Halley 1982i: encounter by Giotto's impact detectors, *Astronom. Astrophys.* **187**, 719-741, 1987
- Mendis D.A., Houppis H.L.F., and Marconi M.L., The Physics of Comets, in *Fund. Cosmic Phys.* **10(1)**, edited by Canuto V.M. and Elmegreen B.G., Gordon and Breach Science Publishers, New York, London, Paris, Montreux, Tokyo, 1985
- Meier R., Labormessungen mit dem GIOTTO-Neutralgasmassenspektrometer: Nacheichung des Zweitinstrumentes mit Kohlenmonoxid und Stickstoff, *Lizentiatsarbeit*, Physikalisches Institut, Uni Bern, 1988

- Millar T.J., Rawlings J.M.C., Bennett A., Brown P.D., and Charnley S.B., Gas phase reactions and rate coefficients for use in Astrochemistry. The UMIST ratefile, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **87**, 585-619, 1991
- Millis R.L., and Schleicher D.G., Rotational period of comet Halley, *Nature* **324**, 646-649, 1986
- Mitchell D.L., Lin R.P., Anderson K.A., Carlson C.W., Curtis D.W., Dorth A., Réme H., Sauvaud J.A., d'Uston C., and Mendis D.A., Evidence for chain molecules enriched in carbon, hydrogen, and oxygen in Comet Halley, *Science* **237**, 626-628, 1987
- Moor R., Massenanalysator und Detektor des Atmosphären-Massenspektrometers SIDAMS: Entwicklung und Tests im Labor, *Dissertation*, Universität Bern, 1989
- Moore M.H., and Tanabé T., Mass spectra of sputtered polyoxymethylene: Implications for comets, *Astrophys. J.* **365**, L39-L42, 1990
- Mumma M.J., and Reuter D., On the identification of formaldehyde in Halley's comet, *Astrophys. J.* **344**, 940-948, 1989
- Nee J.B., Suto M., and Lee L.C., *Chem. Phys.* **98**, 147ff, 1985
- Nicolet M., Figure 4.44, in *Aeronomy of the Middle Atmosphere*, eds. Brasseur G., and Solomon S., 162, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Boston, Lancaster, Tokyo, 1984
- Oort J.H., The structure of the cloud of comets surrounding the Solar System, and a hypothesis concerning its origin, *Bull. Astron. Inst. Neth.* **11**, 91-110, 1950
- Parilis E.S., and Kishinevskii L.M., The Theory of Ion-Electron Emission, *Sov. Phys.* **3(4)**, 885-891, 1960
- Press V.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., and Vetterling W.T., Modeling of Data - Nonlinear Models, in *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing*, 521-528, Cambridge University Press, Cambridge, 1986
- Reinhard R., The Giotto mission to Halley's Comet, in *Exploration of Halley's Comet*, eds. Grewing M., Praderie F., and Reinhard R., 949-958, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1988
- Reljić J., Kurepa M., and Čadež I., Electron-Water Molecule Total Ionization Cross Sections, private communication, 1986
- Rettig T.W., Presentation at *The International Conference on Asteroids, Comets, Meteors 1991*, Flagstaff, Arizona (USA), June 24-28, 1991

- Rudolph P.S., and Melton C.E., Experimental and Theoretical Considerations for Ionization of Simple Hydrocarbons, H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O and the Rare Gases by 2.2-MeV  $\alpha$  Particles and by Electrons in a Mass Spectrometer, *J. Chem. Phys.* **45(6)**, 2227-2232, 1966
- Schmidt H.U., Wegmann R., Huebner W.F., and Boice D.C., Cometary gas and plasma flow with detailed chemistry, *Computer Physics Communication* **49**, 17-59, 1988
- Schmitt E., Messungen der Moleküldissoziation im GIOTTO-Neutralgas-Massenspektrometer an überschallschnellen Düsenstrahlen, *Inaugural-Dissertation*, Ruprecht-Karls-Uni Heidelberg, 1990
- Schulte W., UoB GEOS Chamber Beam Scanner: Estimation of a Hight Voltage Dependant Correction Factor for Ion Beam Intensity Measurements with the Channeltron, internes Memorandum, 19. Oktober 1988
- Schulte W., Handbuch NMS-Eichungen, interner Bericht, Universität Bern, 1989
- Schutten J., de Heer F.J., Moustafa H.R., Boerboom A.J.H., and Kistemaker J., Gross and Partial-Ionization Cross Sections for Electrons on Water Vapour in the Energy Range 0.1-20 keV, *J. Chem. Phys.* **44(10)**, 3924-3928, 1966
- Simon P.C., and Tobiska W.K., Solar EUV Irradiance Variations: A Review, *J. Geophys. Res.*, preprint, 1991
- Snyder L.E., Palmer P., and de Pater I., Radio detection of formaldehyde emission from comet Halley, *Astron. J.* **97**, 246-253, 1989
- Thum F., Sekundärelektronenemission durch Ionenbeschuss von Goldoberflächen, *IPP 9(29)*, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, Garching, 1979
- Timothy J.G., Curved-channel microchannel array plates, *Rev. Sci. Instrum.* **52(8)**, 1131-1142, 1981
- Turner B.E., Detection of SiN in IRC +10216, *Astrophys. J.* **388**, L35-L38, 1992
- Viala Y.P., Chemical equilibrium from diffuse to dense interstellar clouds: I. Galactic molecular clouds, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **64**, 391-437, 1986
- VonHossier M.E., Bartoe J.-D.F., Brueckner G.E., and Prinz D.K., Absolute solar ultraviolet spectral irradiance 120-400 nm (Results from the Solar Ultraviolet Spectral Irradiance Monitor - SUSIM-experiment on board Spacelab 2), *Astr. Lett. and Commun.* **27**, 163-168, 1988
- Wallis M.K., Composition and Evolution of Cometary Nuclei, *Comet Nucleus Sample Return - Proceedings of an ESA Workshop held at the University of Kent at Canterbury (UK) 15 - 17 July 1986*, *ESA Sp-249*, 63-68, 1986

- Weaver H.A., Mumma M.J., and Larson H.P., Infrared Spectroscopy of Cometary Parent Molecules, in (book): *Comets in the Post-Halley Era (Volume 1)*, editors: Newburn R.L. (Jr.), Neugebauer M., Rahe J., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 93-106, 1991
- Whipple F.L., A comet model. II. The acceleration of Comet Encke, *Astrophys. J.* **113**, 375-168, 1950
- Wiza J.L., Microchannel Plate Detectors, *Nucl. Instr. and Meth.* **162**, 587-601, 1979
- Woods T.N., Feldman P.D., Dymond K.F., and Sahnou D.J., Rocket ultraviolet spectroscopy of Comet Halley and abundances of carbon monoxide and carbon, *Nature* **324**, 436-438, 1986
- Wyckoff S., Lindholm E., Wehlnger P.A., Peterson B.A., Zucconi J.-M., and Festou M.C., The  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  abundance ratio in Comet Halley, *Astrophys. J.* **339**, 488-500, 1989
- Wyckoff S., Tegler S.C., and Engel L., Ammonia Abundances in for Comets, *The Astrophys. J.* **368**, 279-286, 1991
- Xingfa X., and Mumma M.J., The Effect of Electron Collision on Rotational Populations of Cometary Water, *Astrophys. J.* **386**, 720-728, 1992

## 7 Verdankungen

Meinem Lehrer, Prof. Dr. P. Eberhardt, danke ich, dass ich diese Arbeit am Physikalischen Institut der Universität Bern durchführen konnte. Von seiner grossen fachlichen Erfahrung, seiner vorbildhaften Betreuung sowie seinen Ratschlägen konnte ich viel profitieren. Besonders danken möchte ich ihm für die wertvollen Diskussionen wie auch die gründliche Durchsicht des Manuskriptes. Beides hat wesentlich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Von der Laborerfahrung und der tatkräftigen Unterstützung der Drs. Urs Dolder und Rudolf Moor konnte ich vor allem während den Detektormessungen viel profitieren, wofür ich ihnen herzlich danke. Nicht unerwähnt lassen möchte ich die durch Dr. Wolfgang Schulte und Leonhard Cadetg geleisteten, umfangreichen Vor- und Begleitarbeiten. Auch ihnen gebührt ein grosses Dankeschön.

Urs Schwab, Dr. Oliver Bratschi und Dr. Martin Steinacher haben im Turnus während den Nacheichungen in der GEOS-Kammer unsere exotischen Ionenstrahlen eingestellt. Vielen Dank! Danken möchte ich auch René Liniger, Jakob Stettler und Martin Neuenschwander für die Unterstützung bei Problemen mit elektrischen Einrichtungen. Bedanken möchte ich mich bei Heinz Hofstetter für seine stets hilfreiche Unterstützung in technischen Belangen und Werner Siegenthaler für die Konstruktion der zahlreichen Abdeckbleche und Halterungen.

Einen besonderen Dank verdienen Dr. Martin Steinacher sowie Michael Oetliker, die den Text und die Figuren unter grossem Zeitdruck auf unverständliche Stellen und Tippfehler hin untersucht haben.

Diese Arbeit wurde durch den Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung unterstützt.

## **8 Lebenslauf**

Am 27. April 1964 wurde ich, Roland Meier, in Langenthal geboren. Nach vier Jahren Primarschule in Langenthal trat ich 1974 in die Sekundarschule über, von der aus ich zwei Jahre später ins Untergymnasium wechselte. Von 1980 bis 1983 bereitete ich mich am Gymnasium Langenthal auf die kantonale Maturitätsprüfung (Typus C) vor, die ich im Herbst 1983 bestand. Noch im gleichen Jahr immatrikulierte ich mich an der Universität Bern im Fach Physik und am Höheren Lehramt. Im Sommer 1988 erwarb ich das Lizentiat im Hauptfach Physik mit Nebenfach Mathematik und Ergänzungsfach Informatik. Die Zeit bis zum Sommer 1989 verbrachte ich mehrheitlich im Militärdienst. Im Sommer 1990 besuchte ich die International Space University in Toronto (Kanada). Im Mai 1992 schloss ich das Höhere Lehramt ab, das mich zur Lehrtätigkeit an höheren Mittelschulen berechtigt.