

INAUGURAL – DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Naturwissenschaftlich-Mathematischen

Gesamtfakultät

der

Ruprecht - Karls - Universität

Heidelberg

vorgelegt von

Diplom-Physiker Jürgen Woweries

aus Heidelberg

– 1989 –

Analyse von Energiespektren der Ionen in der Koma
des Halley'schen Kometen zur Bestimmung der
Produktionsraten von Methan und Ammoniak

Gutachter: Prof. Dr. Hugo Fechtig

Prof. Dr. Karl Otto Münnich

INHALTSVERZEICHNIS

1	EINLEITUNG	1
2	DER ENERGIE-ANALYSATOR DES NMS-EXPERIMENTS	5
2.1	Energie von Teilchen in einer schnell bewegten Meßsonde	5
2.2	Prinzip des Analysators	6
2.3	Aufbau und Funktionsweise	9
2.3.1	Einlaßsystem	10
2.3.2	Ionenquelle	10
2.3.3	Analysierfeld	11
2.3.4	Detektor	11
2.3.5	Energiebereiche, Betriebsarten und Meßsequenzen	13
2.4	Kalibrierung	15
2.4.1	Energie-Kalibrierung	16
2.4.2	Detektorverstärkung	18
3	AUSWERTUNG VON MESSDATEN AUS DER KOMA DES HALLEY'SCHEN KOMETEN	21
3.1	Die Energieverteilungsfunktion von Teilchen bei der Abbildung im Energie-Analysator	21
3.1.1	Thermische Energie und Relativgeschwindigkeit	22
3.1.2	Instrumentelle Einflüsse	23
3.2	Die Aufbereitung der Rohdaten	25
3.3	Das Regressionsverfahren	26
3.4	Ergebnisse	27
3.4.1	Ionen-Temperaturen	30
3.4.2	Abström-Geschwindigkeit	31
3.4.3	Partialdichten	32
3.5	Fehlerbetrachtung	34

4	INTERPRETATION DER MESSERGEBNISSE MIT HILFE EINES KOMAMODELLS	35
4.1	Physikalische und chemische Prozesse in der Kometenkoma	37
4.2	Beschreibung des Koma-Modells	40
4.2.1	Physikalische und chemische Reaktionen	41
4.2.2	Das Differentialgleichungssystem	41
4.2.3	Lösungsmethode	42
4.2.4	Behandlung der Expansion	43
4.2.5	Behandlung der Strahlungsabsorption	44
4.3	Ergebnisse der Rechnungen	49
4.4	Vergleich mit den Messungen	57
4.5	Fehlerbetrachtung	62
4.6	Vergleich mit den Ergebnissen anderer Autoren	63
4.7	Zusammenhang zwischen chemischer Zusammensetzung und Ur- sprung der Kometen	67
5	ZUSAMMENFASSUNG	70
6	LITERATURVERZEICHNIS	72
7	ANHANG	81
7.1	Reaktionsgleichungen	81
7.2	Die Ratengleichungen der Reaktionen	87
7.3	Das Differentialgleichungssystem	90

1 EINLEITUNG

Am 2. Juli 1985 wurde vom Startplatz der Europa-Rakete Ariane in Kourou (franz. Guayana) die Kometensonde GIOTTO gestartet. Nach neunmonatiger Reise zum Kometen Halley kam es in der Nacht des 13. März 1986 zur größten Annäherung zwischen Sonde und Komet, 32 Tage nach dessen Periheldurchgang bei einer heliozentrischen Distanz von 0.9 AE. Die Sonde passierte dabei mit einer Geschwindigkeit von etwa 69 km/s im Abstand von 630 km den Kern des Halley'schen Kometen. Die wissenschaftliche „Fracht“ der GIOTTO -Sonde bestand aus elf Experimenten, die alle zur vollsten Zufriedenheit arbeiteten. Die Wiederkehr des Halley'schen Kometen war nicht nur der Anlaß für die GIOTTO -Mission der europäischen Weltraumorganisation ESA, sondern auch für ein weltweites Beobachtungsprogramm, das sowohl Weltraum-Missionen als auch erdgebundene Beobachtungen umfaßte. Neben GIOTTO dienten noch zwei japanische Sonden (Susei, Sakigake) und die beiden sowjetischen Vega-Sonden der Erforschung des Halley'schen Kometen. Die geringe Distanz mit der GIOTTO den Kern des Halley'schen Kometen passierte, wurde erst durch die Messungen der beiden Vega-Sonden möglich. Diese hatten wenige Tage zuvor (6. und 9. März 1986) die Koma durchflogen und den Kern genau lokalisiert. Die erdgebundenen Beobachtungen, in allen von der Erdoberfläche aus zugänglichen Wellenlängenbereichen wurden von einer eigens hierfür gegründeten Organisation, der International Halley Watch, koordiniert. Diese konzentrierten Bemühungen erbrachten eine Fülle von Daten über diesen Kometen und führten zu einer Intensivierung der wissenschaftlichen Arbeit über die Physik und die kosmophysikalische Bedeutung der Kometen. In den folgenden Jahren erschienen zahlreiche Publikationen, die sich ausschließlich mit diesem Thema befaßten (z.B. Nature 1986 [1], Astronomy and Astrophysics 1987 [2]).

Das Interesse an den Kometen liegt in der Vermutung begründet, daß sie sich zusammen mit dem Planetensystem aus dem präsolaren Nebel gebildet haben.

Ursprungsort der Kometen ist nach heute allgemein akzeptierter Auffassung die „Oort'sche Kometenwolke“, die sich in einer Entfernung von 40000 AE bis 50000 AE von der Sonne befindet und sich bis $\approx 10^5$ AE erstreckt (Oort 1950 [41], Weissmann 1982 [3]). Aus diesem Kometen-Reservoir können durch Bahnstörungen infolge nahe vorbeiziehender Sterne einzelne Körper ins innere Planetensystem gelenkt werden. Weitere Bahnstörungen durch die großen Planeten bewirken eine Verkleinerung der Bahndurchmesser und damit eine Verringerung ihrer Umlaufzeit, was schließlich zu den kurzperiodischen Kometen führt, zu denen auch Halley mit einer Umlaufzeit von etwa 76 Jahren gehört.

Da sich die Kometen seit ihrer Bildung die überwiegende Zeit weit entfernt von der Sonne aufgehalten haben und aufgrund ihrer geringen Größe keine dramatische Veränderung ihrer Materie durch innere Erwärmung (z.B. durch Freisetzung von Akkretionsenergie oder durch die Strahlung natürlicher Radionuklide) erfahren haben (Kiesl 1979 [4]), kann man davon ausgehen, daß sich in ihnen das Material des präsolaren Nebels relativ unverändert erhalten hat. Das hohe Deuterium-Wasserstoff-Verhältnis im kometaren Wasser (Eberhardt et al. 1987 [42]), deutet jedoch darauf hin, daß sich auch interstellares Material im Halley'schen Kometen erhalten hat (Geiss 1988 [43]). Das Studium der Kometen kann also wertvolle Information über die Zusammensetzung der Materie und die Bedingungen bei der Bildung des Sonnensystems liefern.

Ein wesentliches Ziel der GIOTTO -Mission war es deshalb die innere Koma zu durchfliegen und ihre chemische Zusammensetzung zu bestimmen, da mit zunehmender Distanz die Zusammensetzung der abströmenden Materie durch photochemische Prozesse und Sonnenwind-Wechselwirkung verändert wird. Diesem Zweck diente ein Massen-Spektrometer Experiment (NMS) des Max-Planck-Instituts für Kernphysik Heidelberg. Seine Aufgabe war es, die neutralen und ionisierten Bestandteile der Kometenkoma zu identifizieren, sowie deren Häufigkeiten, isotopische Zusammensetzung und Energieverteilung zu bestimmen (Krankowsky et al. 1986 [5]). Das NMS-Experiment verfügt über zwei Sensoren, einen Massenanalysator und einen Energieanalysator. Als Massenanalysator dient ein doppelfokussierendes Massenspektrometer, das mit einer gewissen Anströmwinkelakzeptanz ($\pm 4^\circ$) und innerhalb gewisser Grenzen unabhängig von der Teilchenenergie Teilchen gleichen Masse-Ladungsverhältnisses auf einen Flächendetektor fokussiert. Der Energieanalysator, ein elektrostatischer Plattenanalysator, erlaubt die Messung der Energieverteilung der verschiedenen Komakomponenten,

was Rückschlüsse auf ihren Entstehungsprozess erlaubt. Am NMS-Experiment sind neben dem Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg noch Arbeitsgruppen des physikalischen Instituts der Universität Bern, des CNET-CNRS¹ Paris und der University of Texas in Dallas beteiligt. Diese Arbeit konzentriert sich auf die Auswertung der Daten des NMS-Energie-Analysators. So werden für die vorliegende Arbeit ausschließlich Ionenspektren des Energieanalysators verwendet.

Ziel dieser Arbeit ist zunächst die Berechnung der Massenhäufigkeiten, der Temperatur und der Geschwindigkeit der Ionen aus den gemessenen Energiespektren im inneren, vom Sonnenwind unbeeinflussten, Bereich der Koma. Dieser Bereich wird nach außen durch eine schmale Übergangszone, die sogenannte Kontaktfläche, abgegrenzt, an der sich die Energieverteilung der Ionen drastisch ändert. Die Kontaktfläche trennt die kometaren Ionen innerhalb der Kontaktfläche, von den durch Sonnenwindwechselwirkung modifizierten Ionen außerhalb der Kontaktfläche. Vor Beginn der eigentlichen Auswertung müssen die Rohdaten aufbereitet werden. In einem ersten Schritt werden die Empfindlichkeitsunterschiede der einzelnen Detektorelemente ausgeglichen. Anhand der grafischen Darstellung des Spektrums erfolgt die Beseitigung des Meßuntergrundes. Der Meßuntergrund entsteht hauptsächlich durch Stöße der ins Instrument einströmenden Teilchen mit dem Restgas im Instrument. Während des Vorbeifluges am Kometen wurden deshalb zyklisch Untergrundspektren aufgenommen. Da die Abströmgeschwindigkeit der Teilchen eine Verschiebung des Spektrums bewirkt, muß für jedes Spektrum die Massenskala anhand eindeutig identifizierbarer Massen bestimmt werden. Aus den so aufbereiteten Daten werden erste grobe Startwerte für die Häufigkeiten der einzelnen Massen, Temperatur und Abströmgeschwindigkeit der Teilchen berechnet. Als Ergebnis des Auswerteverfahrens erhält man die Partikeldichten für die verschiedenen Massen, Temperatur und Abströmgeschwindigkeiten in Abhängigkeit vom Abstand zum Kometenkern. Ein Teil der in dieser Arbeit präsentierten Ergebnisse bezüglich der Temperatur der Ionen ist bereits veröffentlicht (Lämmerzahl et al. 1987 [8]).

Das Auflösungsvermögen des Experiments läßt bei den geringen Massenunterschieden einiger Ionensorten, wie z.B. H_2O^+ (18.01 AME) und NH_4^+ (18.03 AME), eine eindeutige Zuordnung der gemessenen Teilchendichte eines bestimmten Masse-Ladungsverhältnisses zur Dichte einer gewissen Ionenspezies nicht ohne wei-

¹Centre de Recherches en Physique de l'Environnement Terrestre et Planétaire

teres zu. Dies erschwert den Rückschluß auf die Produktionsraten der Muttermoleküle, deren Bestimmung ja ein Ziel der Ionenanalyse ist. Die ersten veröffentlichten Ergebnisse bezüglich der Konzentrationen der Muttermoleküle aus Neutralspektren ergaben, daß Wasser mit etwa 80% der dominierende Bestandteil der Koma ist, mit Beimengungen (relativ zu Wasser) von $CO_2 \leq 3.5\%$ (Krankowsky et al. 1986 [6]) und CO etwa 5–7% (Eberhardt et al. 1987 [7]). Für Methan und Ammoniak ließen sich nur obere Grenzen angeben: $NH_3 \leq 10\%$, $CH_4 \leq 7\%$ (Krankowsky et al. 1986 [6]). Der Vergleich von Modellrechnungen mit den Meßergebnissen des Ionenmassenspektrometers (IMS) ergaben für NH_3 1–2% und für CH_4 2% (Allen et al. 1987 [30]).

Die Schwierigkeit bei der Bestimmung der NH_3 - und CH_4 -Konzentrationen aus Neutralspektren ergibt sich aus der Methode des Nachweises. Das Prinzip der Massenspektrometrie, d.h. die Ablenkung von Teilchen durch elektrische und magnetische Felder, ist nur mit geladenen Teilchen möglich. Man muß also die Gase vor dem eigentlichen Nachweis ionisieren. Die Ionisation führt aber auch zur Fragmentierung der Moleküle. So erhält man neben dem Molekülion z.B. CH_4^+ auch die anderen Bruchstücke CH_n^+ ($0 \leq n \leq 3$). Da sich die Massenbereiche der Bruchstücke von NH_3 (14–17 AME) und CH_4 (12–16 AME) sowie von H_2O (16–18 AME) überlappen, ist der Rückschluß auf die Konzentrationen der Muttermoleküle, ohne die genaue Kenntnis der Fragmentierungsmuster, schwierig. Die Analyse der Ionenspektren läßt aber noch einen anderen Weg zur Bestimmung der Produktionsraten der Muttermoleküle zu. Mit Kenntnis der Reaktionsraten der verschiedenen photochemischen Prozesse können die beobachteten Ionenhäufigkeiten als Ergebnis der primären Muttermolekül-Zusammensetzung rechnerisch nachvollzogen werden. Zu diesem Zweck wird ein Modell einer Kometenatmosphäre berechnet. Aufgrund der Expansion der Koma finden die chemischen Reaktionen in einem sich ständig verdünnenden Gas statt, das zunehmend der solaren Strahlung ausgesetzt ist. Die Koma befindet sich deshalb nicht im chemischen Gleichgewicht und läßt sich nur durch chemische Kinetik beschreiben. Das Modell berücksichtigt die drei Muttermoleküle Wasser, Ammoniak und Methan. Andere wie z.B. Kohlenmonoxid oder Kohlendioxid werden nicht miteinbezogen, da sie für die Berechnung der Produktionsraten von CH_4 und NH_3 nicht relevant sind. Das Komamodell wird mit unterschiedlichen Kompositionen der Muttermoleküle berechnet und durch Vergleich mit den gemessenen Ionenspektren das Verhältnis von Wasser, Methan und Ammoniak im Halley'schen Kometen bestimmt.

2 DER ENERGIE-ANALYSATOR DES NMS-EXPERIMENTS

Der Energieanalysator des NMS-Experiment ist ein elektrostatischer Plattenanalysator. Er erlaubt die Messung der Energieverteilung kometarer Ionen und Gase in einem Energiebereich von 23–2140 eV. Aufgrund der hohen Relativgeschwindigkeit zwischen Sonde und Komet von 68.4 km/s ist die beobachtete Teilchenenergie hauptsächlich Bewegungsenergie und damit masseproportional (ca. 24.2 eV/AME). Somit läßt sich dieser Energiebereich für „kalte“ Teilchen direkt in einen Massebereich umrechnen. Der Energieanalysator erweitert so den Meßbereich des Massenanalysators (bis 37 AME) bis hin zur Masse 86 AME. Die Breite der Energieverteilung ist bestimmt durch die thermischen Geschwindigkeiten der Teilchen. Für Temperaturen von einigen 100 K ergeben sich, durch das Auflösungsvermögen des Instruments, deutlich voneinander getrennte Peaks für die einzelnen Massen. Dies gilt jedoch nicht für Teilchen, die aufgrund ihrer Entstehung in einer exothermen Reaktion zusätzliche Energie besitzen. So können z.B. Sauerstoffatome, die durch Photodissoziation aus CO gebildet werden, Eigengeschwindigkeiten von 5 km/s aufweisen. Dies bewirkt eine Verbreiterung ihrer Energieverteilung (parallele und antiparallele Geschwindigkeit). Diese breitere Energieverteilung wird sich dem „Linienspektrum“ der thermischen Komponenten (z.B. der Muttermoleküle) überlagern.

2.1 Energie von Teilchen in einer schnell bewegten Meßsonde

Die kinetische Energie von im Koordinatensystem des Kometen ruhenden Teilchen der Masse m ist bestimmt durch die Relativgeschwindigkeit V_{rel} zwischen Komet und Sonde

$$E = \frac{1}{2} m V_{rel}^2 \quad (2.1)$$

Mit der Elementarladung e und der Definition für die atomare Masseneinheit AME ergibt sich für die Relativgeschwindigkeit von $V_{rel} = 68.373 \text{ km/s}$ die Energie in eV pro AME zu:

$$E(\text{eV}) = 24.226 * m(\text{AME}) \quad (2.2)$$

$$e = 1.602192 * 10^{-19} \text{ C} \quad 1 \text{ AME} = (1/12) m(^{12}\text{C}) = 1.66055 * 10^{-27} \text{ kg}$$

Haben die Teilchen Eigengeschwindigkeiten V_{eig} , die mit der Relativgeschwindigkeit den Winkel α ($0 \leq \alpha \leq 180^\circ$) einschließen, so geht in die Berechnung der kinetischen Energie die resultierende Geschwindigkeit V_{res} ein. Diese erhält man durch Vektoraddition von V_{eig} mit V_{rel} . Dann gilt für die kinetische Energie E der Teilchen:

$$E = \frac{1}{2} m V_{res}^2$$

$$E = \frac{1}{2} m (V_{rel}^2 + V_{eig}^2 - 2 V_{rel} V_{eig} \cos \alpha) \quad (2.3)$$

So ergibt sich für die oben erwähnten Sauerstoffionen mit einer Geschwindigkeit von 5 km/s eine Energieverteilung die sich von 340 eV bis 450 eV erstreckt. Die mittleren thermischen Geschwindigkeiten sind jedoch geringer, so z.B. für H_3O^+ etwa 580 m/s bei 300 K.

2.2 Prinzip des Analysators

Abb. 2.1 zeigt den prinzipiellen Aufbau des elektrostatischen Plattenanalysators und die Lage des Koordinatensystems. Der Analysator besteht aus zwei parallelen Platten mit dem Abstand d . Zwischen diesen Platten herrscht ein elektrisches Feld der Feldstärke \vec{F} . Die vordere Platte, durch die der Eintritt der Teilchen in das elektrische Feld erfolgt, liegt in der Ebene $y = 0$, die hintere Platte in

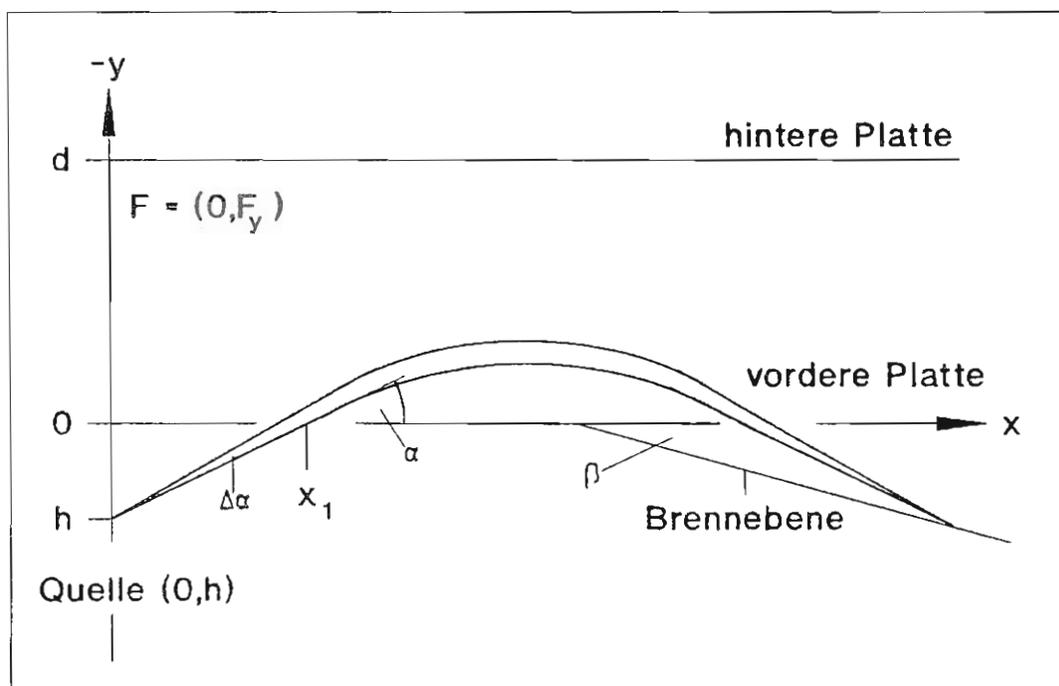


Abbildung 2.1: Prinzipieller Aufbau des Plattenanalysators. Die Abbildung zeigt die Lage des Koordinatensystems und die Teilchenbahnen für verschiedene Einschufwinkel.

der Ebene $y = -d$. Die Quelle der Teilchen befindet sich im feldfreien Raum bei $x = 0, y = +h$.

Die Teilchen bewegen sich geradlinig von der Quelle zur vorderen Platte und treten unter dem Winkel α in das elektrische Feld ein. Dieser Eintrittspunkt berechnet sich zu:

$$x_1 = h \cot(\alpha) \quad (2.4)$$

Der Einfluß des elektrischen Feldes erzwingt eine parabelförmige Bahn zwischen den Platten. Nach dem Verlassen des Feldes bewegen sich die Teilchen wieder geradlinig weiter. Für die zurückgelegte Distanz x gilt dann:

$$x = (h + y) \cot(\alpha) + \frac{2E}{F} \sin(2\alpha) \quad (2.5)$$

Hierbei ist E die kinetische Energie der Teilchen und \vec{F} die Feldstärke zwischen vorderer und hinterer Platte. Teilchen aus der gleichen Quelle mit unterschiedlichen Eintrittswinkeln α werden in einem Brennpunkt erster Ordnung fokussiert, wenn $dx/d\alpha = 0$ für $y = \text{const.}$ Mit Gleichung 2.5 findet man, daß dies der Fall ist für:

$$h + y = \frac{4E}{\vec{F}} (\cos(2\alpha) \sin^2(\alpha)) \quad (2.6)$$

Die Brennpunkte für verschiedene Eintrittsenergien E liegen deshalb auf einer Geraden:

$$x = (h + y) \cot(\alpha) \left(1 + \frac{1}{\cos(2\alpha)} \right) \quad (2.7)$$

Diese Brennebene bildet mit der x -Achse den Winkel β :

$$\tan(\beta) = \frac{\tan(\alpha) \cos(2\alpha)}{1 + \cos(2\alpha)} \quad (2.8)$$

Man erkennt, daß es für jeden Winkel α eine Brennebene gibt, die für $\alpha = 45^\circ$ mit der vorderen Platte zusammenfällt. Abweichungen von diesem Fokus erster Ordnung können sich dadurch ergeben, daß zwar $dx/d\alpha = 0$ ist, jedoch andere Terme z.B. $d^2x/d\alpha^2$ etc. ungleich null sind. Weitergehende Betrachtungen (Green und Proca 1970 [9]) zeigen, daß für $\alpha = 30^\circ$ Fokussierung zweiter Ordnung vorliegt, d.h. daß auch die quadratischen Terme gleich null sind. Für diesen Eintrittswinkel von 30° beträgt der Winkel zwischen x -Achse und Brennebene 10.9° . Numerische Rechnungen, die Abweichungen vom idealen Feldverlauf durch Randfelder etc. berücksichtigen, ergeben einen Neigungswinkel der Brennebene von 10.2° (Anweiler 1984 [10]). Die Fokussierung erfolgt nur in einer Ebene, dies kann aber wegen der guten Ausrichtgenauigkeit der Sonde zum relativen Flugvektor (besser als 1°) und wegen der Breitenausdehnung des Detektors von 5 mm in Kauf genommen werden.

2.3 Aufbau und Funktionsweise

Der Energie-Analysator besteht aus Einlaßsystem, Ionenquelle, Analysierfeld und Detektor. Abb. 2.2 zeigt den Gesamtaufbau. Die Einlaßachse ist parallel zum Flugvektor der Sonde ausgerichtet. Um das Einlaßsystem und die Ionenquelle vor dem Einschlag von kometarem Staub zu schützen, sind alle Teile, die dem ankommenden Teilchenstrahl direkt ausgesetzt sind, aus massivem Material gefertigt. Alle kritischen Teile, wie die Glühkathoden und Blenden in der Ionenquelle, sind aus der Strahlrichtung versetzt angebracht und so vor Staubeinschlag geschützt. Das ganze Instrument kann in einem Winkelbereich von $\pm 4^\circ$ um die Einlaßachse, vom Eintrittsschlitz ausgehend, von Gas und Staub frei durchflogen werden.

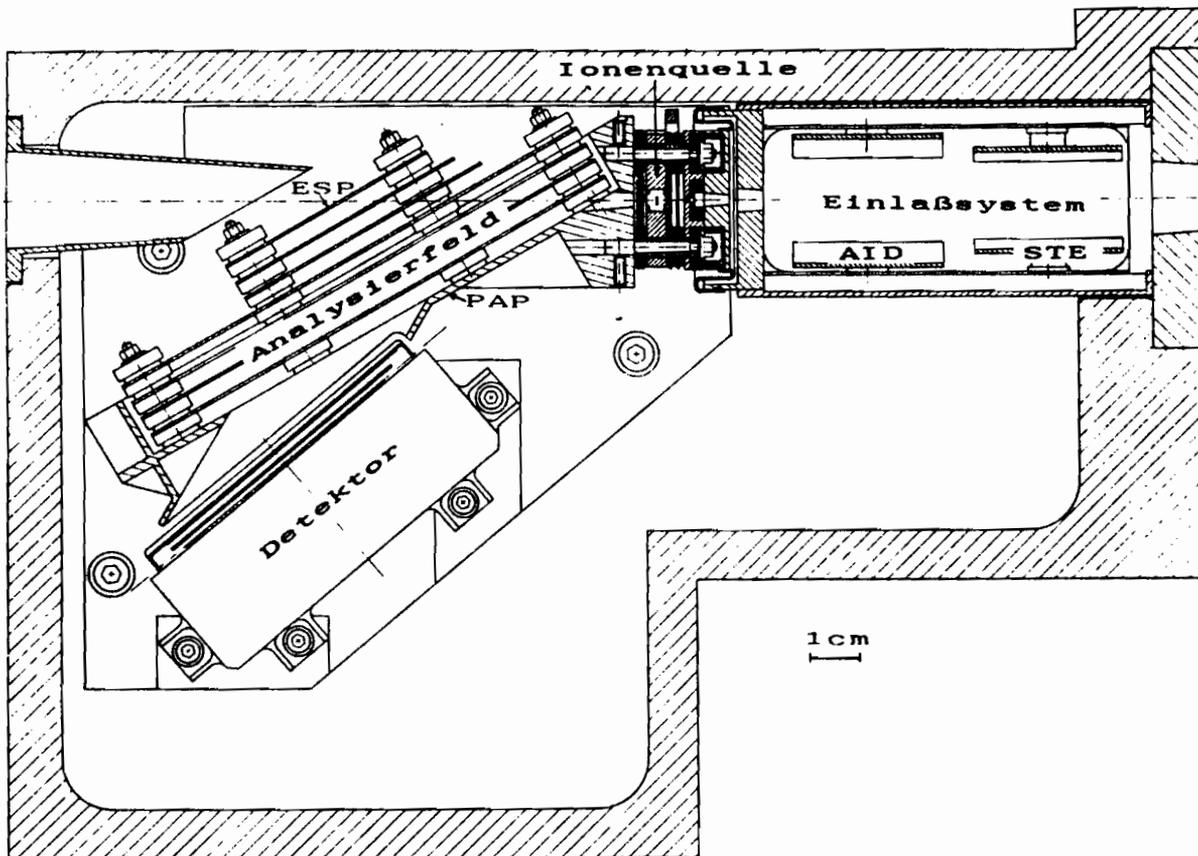


Abbildung 2.2: Gesamtaufbau des Energie-Analysator. Die Abbildung zeigt die relative Anordnung von Einlaßsystem, Ionenquelle, Analysierfeld und Detektor. Im Einlaßsystem sind die beiden Blendenpaare AID (Ambient Ion Deflection) und STE (Steering Electrodes) gekennzeichnet.

2.3.1 Einlaßsystem

Das Einlaßsystem wird durch die beiden Elektrodenpaare AID (Ambient Ion Deflection) und STE (Steering Electrodes), den Objektschlitz und die Blende SIL (Secondary Ion Suppressor Lens) gebildet. Bei Neutralmessungen werden die kometaren Ionen durch Anlegen einer Querspannung an die AID- und STE-Elektroden ausgeblendet. Bei Ionenmessungen können diese Elektrodenpaare dazu dienen, Ionen, die nicht mit dem nominalen Winkel eintreffen, in den Analysator zu lenken; diese Betriebsart wird aber nur im äußeren Bereich der Koma angewendet. Für alle in dieser Arbeit verwendeten Messungen war $AID = STE = 0 \text{ V}$. Die engste Stelle im Einlaßsystem ist der Objektschlitz ($0.2 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$). Die Blende SIL hinter dem Objektschlitz verhindert bei Neutralmessungen mit ihrem Potential von $+2500 \text{ V}$ das Eindringen von Ionen, die durch Stoßionisation (Staub, Gas) an den Rändern des Schlitzes gebildet werden können. Bei Ionenmessung liegt SIL auf 0 V .

2.3.2 Ionenquelle

Neutrale Teilchen müssen vor Eintritt in das Analysierfeld des Parallel-Platten-Analysators ionisiert werden. Dies wird durch eine Elektronenstoß-Ionenquelle erreicht, in die der Gasstrahl eintritt. Diese Ionenquelle ist als 'Fly-Through'-Ionenquelle ausgeführt, d.h. Gasmoleküle die durch den Objektschlitz eintreten, stoßen nicht mehr auf Wände und behalten bei der Ionisation ihre Geschwindigkeit. Eigentlicher Ionisationsort ist die sogenannte Ion Source Box (ISB), die auf Potential 0 V liegt. Hier wird der eintretende Gasstrahl senkrecht von einem Elektronenstrahl durchsetzt. Der Elektronenstrahl wird von einer Glühkathode erzeugt und durch das Magnetfeld eines Permanentmagneten geführt. Es stehen zwei Ionisationsenergien zur Verfügung (17 eV und 90 eV). Die Emissionsstromstärken sind $300 \mu\text{A}$ bei 90 eV und $250 \mu\text{A}$ bei 17 eV . Bei 90 eV ist die Ionenausbeute maximal. Die Ionisationsenergie von 17 eV erlaubt, unter Ausnutzung der unterschiedlichen Erscheinungspotentiale, chemisch verschiedene Moleküle mit gleicher Massenzahl aber verschiedenen Ionisierungspotentialen zu unterscheiden (Rehm 1986 [11]). Bei Ionenmessungen wird die Glühkathode auf positives Potential gelegt und so das Eintreten von Elektronen in die ISB verhindert (Subemission). Damit ist sichergestellt, daß neutrale Teilchen nicht ionisiert werden.

Zwei Blenden, SLS (Supressor Lens Shield) an der Eintrittsseite der ISB und AVS (Accelerating Voltage Shield) am Austritt der ISB, verhindern den Durchgriff von SIL und IAE (Intermediate Accelerating Potential) in die ISB. Die IAE-Elektrode bewirkt eine Zwischenbeschleunigung, die PAP-Spannung (PAP: Pre-Accelerating Potential = 650V) schließlich, erhöht die Energie der ionisierten Teilchen um zusätzliche 650 eV. Dies bewirkt eine Komprimierung der auf den Detektor abgebildeten Massebereiche.

2.3.3 Analysierfeld

Als Analysator wird ein elektrostatischer Parallel-Platten-Analysator (PPA) verwendet. Das Analysierfeld ist ein homogenes elektrisches Feld zwischen zwei parallelen Platten, in das die zu analysierenden Teilchen unter einem Winkel von $30^\circ (\pm 4^\circ)$ durch die vordere Platte eintreten. Das Analysierfeld wird durch die Potentialdifferenz zwischen vorderer Platte (PAP) und hinterer Platte (ESF: Energy-Separation Plate) gebildet. Um äußere Felddurchgriffe zu vermeiden, sind zwischen beiden Platten rahmenförmige Abschirmelektroden in äquidistanter Anordnung angebracht, die mit Hilfe von Widerständen die Analysierfeldspannung unterteilen. Dadurch wird im Bereich der Teilchenbahnen das Feld eines idealen Plattenkondensators erzwungen. Zwischen den Platten beschreiben die Teilchen Parabelbahnen und treten wieder durch die vordere Platte aus. Zu dieser um 10.2° geneigt ist der Detektor angebracht. Es sind drei (Neutralmessung) bzw. zwei (Ionenmessung) Analysierfeldspannungen einstellbar, um unterschiedliche Massebereiche auf den Detektor abzubilden (siehe unter 2.3.5).

2.3.4 Detektor

Die Eigenschaften des Analysators und die Gegebenheiten einer Kometenatmosphäre stellen besondere Anforderungen an das Detektorsystem. Große Anforderungen an den dynamischen Bereich ergeben sich daraus, daß die Konzentration der Muttermoleküle exponentiell mit der Entfernung zum Kern abnimmt. Da man sowohl Ionen als auch Gase mit dem selben Gerät mißt, erstreckt sich der zu überdeckende Teilchenflußbereich über mehr als zehn Größenordnungen (Krankowsky et al. 1986 [5]).

Wie in Kap. 2.2 erwähnt, fokussiert der Analysator die kometaren Ionen auf eine

Brennebene. Dies bedeutet, daß der Detektor neben dem Teilchennachweis und der Messung des Teilchenflusses auch die Information über den Ort des Auftreffens der Ionen auf der Brennebene (= Energieinformation) liefern muß. Als Detektorsystem wurden deshalb Mikrokanalvervielfacher (MCP: Micro-Channel-Plate) mit ortsempfindlichen Elektronendetektoren (Anodenarrays) gewählt.

Die verwendeten MCP's bestehen aus einer Vielzahl von Kanälen mit einem Durchmesser von $25 \mu\text{m}$, die in hexagonal dichtester Packung zusammengefaßt sind. Die Kanäle werden durch dünne Glasröhrchen gebildet, auf deren Innenseite eine Widerstandsschicht aufgebracht ist. Diese hochohmige Schicht dient als kontinuierlicher Spannungsteiler und als Sekundärelektronenemitter. Trifft ein Teilchen mit genügender Energie (etwa 600 eV für Ionen (Berthelie 1984 [12])) auf die kathodenseitige Kanalwand, so löst es Sekundärelektronen aus. Diese werden in Richtung zum höheren Potential beschleunigt, treffen erneut auf die Wand und lösen weitere Sekundärelektronen aus. Dieser Prozeß setzt sich lawinenartig fort, so daß schließlich an der Anode ein Ladungsstoß nachweisbar ist. Eine ausführliche Beschreibung des Aufbaus, der Funktionsweise und der Einsatzmöglichkeiten von Micro-Channel-Plates geben Wolf [13] und Timothy [14].

Der Detektor besteht aus zwei Micro-Channel-Plates und zwei Anodenarrays von zusammen 50 mm Länge und 5 mm Breite. Die Anodenarrays bestehen ihrerseits aus 64 schmalen metallisierten Streifen (Pixel). Auftreffende Ionen lösen in den MCP's Elektronenlawinen aus, deren Verstärkung durch Anlegen einer Hochspannung variiert werden kann. Die Verstärkung erstreckt sich von etwa 10^6 bei 1700 V bis zu 10^{-2} bei 500 V Hochspannung. Die so entstandenen Ladungsimpulse werden mit 103 V zu den Anoden nachbeschleunigt, die auf Potential 0 V liegen. In den einzelnen Anoden werden die Ladungen akkumuliert, nach einer definierten Zeit sequentiell ausgelesen und verstärkt. Anschließend werden sie einem 12 Bit A/D-Wandler zugeführt und digitalisiert, wobei ein Bit einer Ladung von $3.4 * 10^{-14} \text{ C}$ entspricht. Jede Anode besitzt einen 24 Bit Akkumulator A und einen Eingabezähler N. Je nach Messmodus werden $N = 7$ bis $N = 15$ Detektorauslesungen akkumuliert und der Mittelwert A/N gebildet. Wegen der beschränkten Telemetrierate werden die Werte A/N logarithmisch von 12 auf 8 Bit komprimiert, bevor sie an die Telemetrie weitergegeben werden. Der Kompressionsalgorithmus lautet:

$$21.25 \log_2(A/N + 1) \quad (2.9)$$

Damit wird eine über den ganzen Bereich konstante Übertragungsgenauigkeit von 3.3% erreicht (Hodges 1985 [15]).

Das Analysatorprinzip erfordert für die das Analysierfeld verlassenden Teilchen einen feldfreien Raum. Um dies zu gewährleisten ist 3 mm über der MCP-Oberfläche ein Gitter angebracht das auf PAP-Potential liegt und so die MCP-Hochspannung (MHV) abschirmt. Ein weiteres Gitter (Repeller-Gitter) 1 mm über der MCP-Oberfläche sollte ursprünglich mit einem Potential von $-50V$ (MCR) relativ zur Hochspannung an der MCP-Oberfläche verhindern, daß Sekundärelektronen die MCP-Kanäle verlassen und zur Lawinenbildung nicht beitragen. Bei den Messungen zur Energiekalibrierung des Instruments mit monoenergetischen Ionen- und Gasstrahlen zeigte sich jedoch, daß bei dieser Einstellung ein zweiter Peak niedrigerer Energie auftrat. Genaue Untersuchungen und Simulationsrechnungen (Woweries 1985 [16]) ergaben, daß dieser Nebenpeak durch Sekundärelektronen ausgelöst wird, die die MCP-Oberfläche verlassen. Diese beschreiben in dem retardierenden Feld zwischen MCP und Repeller-Gitter parabelförmige Bahnen, treffen wieder auf das MCP und erzeugen so einen zweiten Peak. Um diesen Nebenpeak zu unterdrücken wurde die Repeller-Spannung auf $+50V$ relativ zu MHV geändert, damit Sekundärelektronen, die die MCP-Oberfläche verlassen, abgesaugt werden.

2.3.5 Energiebereiche, Betriebsarten und Meßsequenzen

Der Energieanalysator verfügt über vier Betriebsarten (STI: Ionenmessung aus Richtungen bis zu 30° vom Flugvektor, ION: Ionenmessung in Bewegungsrichtung, N90: Neutralmessung mit hoher Ionisierungsenergie, N20: Neutralmessung mit niedriger Ionisierungsenergie). Um den ganzen Energiebereich von 23 bis 2140 eV zu überdecken, werden durch Variation der Analysierfeldspannung (ESP) verschiedene Energiebereiche quasi-linear auf den Detektor abgebildet. So werden bei Ionenmessungen zwei, bei Neutralmessungen drei Energiebereiche nacheinander gemessen. In Tabelle 2.1 sind diese Energiebereiche mit den korrespondierenden Massenbereichen für Ionenmodus und Neutralmodi aufgeführt.

Zusätzlich werden noch drei Untergrundmessungen vorgenommen. Dies sind der

Neutralmodi		
	Energiebereich	Massenbereich
Bereich I:	200 eV – 860 eV	8 AME – 35 AME
Bereich II:	530 eV – 1440 eV	22 AME – 59 AME
Bereich III:	920 eV – 2140 eV	38 AME – 88 AME
Ionenmodus		
	Energiebereich	Massenbereich
Bereich I:	23 eV – 540 eV	1 AME – 22 AME
Bereich II:	519 eV – 1425 eV	22 AME – 58 AME

Tabelle 2.1: Energiebereiche des Energieanalysators. Für thermische Teilchen ergeben sich die angegebenen Massenbereiche.

Anodenuntergrund (RBK: Reticon Background), der Neutraluntergrund (NBK: Neutral Background) und der Ionenuntergrund (IBK: Ion Background). Die Anoden weisen einen temperaturabhängigen Untergrund von etwa 8 bis 15 Bit auf. Dieser wird in jeder Meßsequenz (siehe unten) einmal gemessen. Bei der Messung des RBK wird die Analysierfeldspannung auf Null gesetzt, damit keine Ionen auf den Detektor gelangen können. Außerdem wird die niedrigste Verstärkungsstufe gewählt. Für jedes Anodenarray wird durch statistische Analyse der Mittelwert (BKAVG) bestimmt. Beim Akkumulieren wird der ganzzahlige Anteil von BKAVG-1 vom ausgelesenen Wert jeder Anode subtrahiert, bevor dieser im entsprechenden Akkumulator addiert wird. Zur Messung des Neutraluntergrundes wird die Ionenquelle in Subemission geschaltet und das Einlaßsystem ist für Gase konfiguriert. Bei der Messung des Ionenuntergrundes ist die Ionenquelle ebenfalls in Subemission und im Einlaßsystem wird, durch Anlegen einer Querspannung an die AID- und STE-Elektroden, das Eindringen von Ionen verhindert.

Die Meßsequenzen sind vorprogrammierte Folgen verschiedener Betriebsarten. Eine Meßsequenz dauert genauso lange wie ein Telemetrieformat (22.67 s). Es gibt drei verschiedene Sequenzen (SIS: Steered Ion Sequence, NIS.C: Neutral Ion Sequence Close, NIS.F: Neutral Ion Sequence Far). Die Sequenz SIS gestattet es, einen Ausschnitt aus dem Phasenraum der Ionen zu messen. Diese Sequenz wird jedoch nur im äußeren Bereich der Koma benutzt. Die Sequenz NIS.F erlaubt die Messung von Ionen und Gasen niedriger Konzentration in großer Entfernung vom Kometen, während NIS.C dafür konzipiert ist, Ionen und Gase mit höhe-

Nr.	NIS.F		NIS.C		Nr.	NIS.F		NIS.C	
1	RBK		RBK		9	IBK	HG	IBK	HG
2	N90	GS	N90	HG	10	N90	GS	N90	HG
3	N90	HG	N20	GS	11	N90	HG	N20	GS
4	ION	GS	ION	GS	12	ION	GS	ION	GS
5	N20	GS	NBK	HG	13	NBK	HG	NBK	HG
6	N90	GS	N90	GS	14	N90	GS	N90	GS
7	N90	HG	N20	HG	15	N90	HG	N20	HG
8	ION	HG	ION	HG	16	ION	HG	ION	HG

Tabelle 2.2: Die 16 aufeinanderfolgenden Betriebsarten der beiden Meßsequenzen NIS.F und NIS.C. Die Abkürzung GS bedeutet, daß das Spektrum mit nominaler Detektor - Verstärkung aufgenommen wird. HG steht für High Gain, einer etwa um den Faktor 30 höheren Verstärkung (siehe Kap. 2.4.2).

rer Konzentration zu messen, die man nahe dem Kometen erwartet. In Tabelle 2.2 sind die verschiedenen Betriebsarten für die beiden Sequenzen NIS.F und NIS.C aufgelistet. In der Sequenz NIS.C wird häufiger in der Betriebsart mit der niedrigen Ionisierungsenergie gemessen, weil nahe am Kometen die Neutralgasdichte hoch genug ist, um auch im N20 Modus Spektren hoher Intensität zu erzeugen. Die niedrigere Ionisationsenergie bewirkt auch eine verminderte Fragmentierung der Muttermoleküle bei der Ionisation. Da der Meßuntergrund mit der Gasdichte zunimmt (siehe 3.2), wird in der Sequenz NIS.C eine zusätzliche Untergrundmessung vorgenommen.

2.4 Kalibrierung

Die Detektorkalibrierung wurde mit Strahlen verschiedener Ionen wie ${}^4\text{He}^+$, N_2^+ , ${}^{40}\text{Ar}^+$ und Xe^{++} durchgeführt. Die Energie der Ionenstrahlen wurde jeweils so gewählt, daß sie der Relativgeschwindigkeit (Komet - Sonde) von 69 km/s entsprach. Ziel der Messung war die genaue Kalibrierung der Energieskala und der Detektorverstärkung.

Um aus den Spektren des Energieanalysators die physikalischen Bedingungen der Kometenatmosphäre, wie z.B. Temperatur (Peakbreite) und Abströmgeschwindigkeit der Ionen und Gase (Peakverschiebung), zu bestimmen, ist eine genaue Kenntnis der Energieskala erforderlich. Durch die elektrischen Felder zwischen den beiden Detektorgittern und der MCP-Oberfläche ist die Energieskala nicht nur von der Analysierfeldspannung (ESP) sondern auch von der eingestellten Detektorhochspannung (MHV) abhängig. Diese Abhängigkeit wurde schon am Flugersatzmodell untersucht. Die Messungen ergaben, daß sich für jeweils konstante Hochspannung (MHV) eine quasi-lineare Beziehung zwischen Energie der eingeschossenen Ionen und Pixelnummer ergibt (Woveries 1985 [16]).

2.4.1 Energie-Kalibrierung

Ziel der Energie-Kalibrierung war es, die genaue Beziehung zwischen der Energie eines Ionenstrahls und der Position (Pixelnummer) des entsprechenden Peaks auf dem Detektor, in Abhängigkeit von den eingestellten Analysatorspannungen (MHV, ESP), zu ermitteln. Die Peakposition wurde durch einen Parabelfit über dem Pixel maximaler Intensität und dessen beiden Nachbar-Pixeln bestimmt. MCP 1 (niedrige Energie) besitzt die Pixel 1 – 64, MCP 2 (hohe Energie) hat die Pixel 65 – 128. Der Auftreffpunkt eines Ions einer gewissen Energie auf dem Detektor (*PIX*: Pixelnummer) läßt sich durch folgende Gleichung beschreiben (Lämmerzahl 1986 [17]):

$$PIX = a_i \left(\frac{U + PAP}{ESP} \right) + b_i - OFFSET_i \quad (2.10)$$

Der lineare Term mit den beiden Parametern *a* und *b* ergibt sich aus der Theorie des Analysators, wobei *U* die kinetische Energie des Ions (in eV) ist und *ESP* und *PAP* die Analysatorspannungen (in V) sind. Der zweite Term *OFFSET* beschreibt die Ablenkung durch die elektrischen Felder im Detektor. Der Index *i* soll andeuten, daß man für die beiden MCP's, wegen ihrer getrennten Montage, grundsätzlich verschiedene Parameter zulassen sollte.

Die abschirmende Wirkung der Detektorgitter ist, wie erwartet, nicht perfekt. Aufgrund der Lochgröße von 0.5 * 0.5 mm kommt es zu Felddurchgriffen in den „feldfreien Raum“ zwischen Analysator und Detektor. Dies führt dazu, daß der Parameter *OFFSET* größer ist als man bei idealen Annahmen erwartet. Dies

läßt sich durch einen effektiven Gitterabstand $d_{2,eff}$ beschreiben, der vom nominalen $d_2 = 2$ mm zwischen äußerem Gitter und Repeller abweicht. Die Untersuchungen ergaben (Lämmerzahl 1986 [17]):

$$d_{2,eff}(1) = 3.488 \left(\frac{U + 650.5}{ESP} \right) - 1.643 \quad (2.11)$$

$$d_{2,eff}(2) = 0.742 \left(\frac{U + 650.5}{ESP} \right) + 1.884 \quad (2.12)$$

Mit Hilfe dieses effektiven Gitterabstandes läßt sich die Größe *OFFSET* berechnen (Lämmerzahl 1986 [17]):

$$OFFSET(inPixel) = 2.5 \left(\frac{d_2 + d_1}{\tan(19.8^\circ)} - x_1 - x_2 \right) \quad (2.13)$$

$$x_1 = \left(\frac{U + MHV + 52.1}{51.1} \right) d_1 \sin(2\theta_r) \left(\sqrt{1 + \frac{51.1}{(U + MHV + 52.1) \sin^2(\theta_r)}} - 1 \right)$$

$$x_2 = \left(\frac{U + 650.5}{MHV - 598.4} \right) d_2 \sin(39.6^\circ) \left(\sqrt{1 + \frac{MHV - 598.4}{(U + 650.5) \sin^2(19.8^\circ)}} - 1 \right)$$

$$\theta_r = \arctan \left(\tan(19.8^\circ) \sqrt{1 + \frac{MHV - 598.4}{(U + 650.5) \sin^2(19.8^\circ)}} \right)$$

Dabei ist für d_2 der effektive Gitterabstand $d_{2,eff}$, für d_1 der nominale Abstand zwischen Repeller-Gitter und MCP-Oberfläche von 1 mm und für MHV der Betrag von MHV einzusetzen. θ_r ist der Winkel unter dem die Teilchen das Repeller-Gitter passieren.

Die Kalibrierungsmessungen wurden in der GEOS-Eichkammer der Universität Bern durchgeführt. Eine Beschreibung der Anlage geben Ghielmetti et al. 1983 [18]. Die Messungen wurden mit monoenergetischen Ionenstrahlen durchgeführt, deren Energiebreite nur 1–2 eV betrug. Die absolute Genauigkeit des Energieanalysators beträgt deshalb, je nach Energiebereich, zwischen ± 2 eV und ± 4 eV.

2.4.2 Detektorverstärkung

Die Detektorverstärkung des Energieanalysators ist in 16 Schritten einstellbar (Gainstep 0 bis F), wobei die Verstärkungsstufe 15 (Gainstep F) der höchsten Verstärkung entspricht. Die Verstärkung für eine gegebene MHV ist definiert als die mittlere Verstärkung der 16 zentralen Pixel der beiden MCP's. Die einzelnen Pixel sind jedoch nicht gleich empfindlich, deshalb wurde bei der Kalibrierung der Detektorverstärkung auch die relative Empfindlichkeit (relative gain) der einzelnen Pixel bestimmt (für jede Verstärkungsstufe getrennt). Die relative Empfindlichkeit eines Pixels ist definiert als der Quotient aus Verstärkung dieses Pixels und der mittleren Verstärkung.

Bei hohen Zählraten muß noch ein weiterer Effekt berücksichtigt werden, den man als Nichtlinearität bezeichnet. Dieser Effekt setzt ein, wenn bei hoher Ionenstromdichte auf den MCP's die durch den Multiplikationsprozess extrahierten Elektronen bis zum nächsten Puls nicht vollständig durch den Polarisationsstrom der MCP's nachgeliefert werden können. Die so entstandene Verarmung der Oberfläche an Elektronen bewirkt eine geringere Verstärkung (Dolder 1986 [19]). Die Nichtlinearität NL muß nur korrigiert werden, wenn die Zählrate einen gewissen Wert (Startwert) überschreitet, d.h. bei Zählraten $<$ Startwert ist $NL = 1$. Für Zählraten $>$ Startwert macht man einen linearen Ansatz:

$$NL = A * \text{Zählrate} + B \quad (2.14)$$

Die Steigung A und Achsenabschnitt B sind so definiert, daß für Zählraten $>$ Startwert $NL < 1$ ist. Die Parameter Startwert, A und B wurden für jedes MCP getrennt und für alle Verstärkungsstufen bestimmt.

Die Verstärkungskalibrierungen wurden ebenfalls mit den in Kapitel 2.4 beschriebenen Ionenstrahlen durchgeführt. Die Intensität der Ionenstrahlen war mit einer Genauigkeit von besser als 10% bekannt d.h. die absolute Verstärkung konnte mit vergleichbarer Genauigkeit bestimmt werden (Krankowsky et al. 1986 [5]). Die Verstärkungsfaktoren der verschiedenen Stufen sind in Tabelle 2.3 aufgelistet.

Die relativen Verstärkungen der einzelnen Pixel, bei den verschiedenen Verstärkungsstufen, konnten mit einer Genauigkeit von 2 bis 3% bestimmt werden

Stufe	MCP-Hochspannung	Verstärkungsfaktor
0	472 V	$1.32 * 10^{-2}$
1	520 V	$4.47 * 10^{-2}$
2	565 V	$1.53 * 10^{-1}$
3	610 V	$5.27 * 10^{-1}$
4	655 V	$1.70 * 10^0$
5	700 V	$5.63 * 10^0$
6	750 V	$1.77 * 10^{+1}$
7	805 V	$5.82 * 10^{+1}$
8	865 V	$1.87 * 10^{+2}$
9	925 V	$6.52 * 10^{+2}$
A	990 V	$2.23 * 10^{+3}$
B	1055 V	$7.92 * 10^{+3}$
C	1130 V	$2.64 * 10^{+4}$
D	1240 V	$9.15 * 10^{+4}$
E	1380 V	$2.98 * 10^{+5}$
F	1750 V	$9.82 * 10^{+5}$

Tabelle 2.3: Die 16 Stufen der Detektorverstärkung mit ihrer MCP-Hochspannung (MHV) und den Verstärkungsfaktoren.

(Krankowsky et al. 1986 [5]). Neuere Erkenntnisse deuten allerdings auf einen höheren Fehler von $\approx 15\%$ hin (Krankowsky 1989 [39]).

Während des Vorbeifluges am Kometen wurde von der Elektronik des Instruments, unter Ausnutzung der Signalstärke der vorherigen Messung, die optimale Verstärkungsstufe automatisch eingestellt. Diese Regelung besitzt zwei Algorithmen zur Bestimmung der einzustellenden Verstärkungsstufe; der erste (GS: Gainstep) hält das maximale Signal unterhalb der Sättigungsgrenze der MCP's, der zweite (HG: High Gain) wählt eine Verstärkung die etwa um den Faktor 30 höher ist und erlaubt so die genauere Messung von Spezies geringer Intensität. Während der Mission wurde zyklisch zwischen beiden Algorithmen umgeschaltet.

Die Verstärkungsfaktoren < 1 ergeben sich dadurch, daß eine Anode des Detektors die Ladungen von etwa 4000 MCP-Kanälen aufnimmt. Die Verstärkung eines einzelnen Kanals ist natürlich entweder 0 (keine Elektronenlawine ausgelöst) oder > 1 (Lawine ausgelöst). Je niedriger jedoch die MHV ist, umso geringer ist die Wahrscheinlichkeit, daß eine Elektronenlawine ausgelöst wird und umso geringer ist auch die Anzahl der Elektronen der Lawine. Bei niedriger MHV kann es also dazu kommen, daß die Verstärkung der einzelnen Kanäle relativ gering ist und nur sehr wenige Kanäle ansprechen, so daß sich insgesamt eine Verstärkung < 1 ergibt.

3 AUSWERTUNG VON MESSDATEN AUS DER KOMA DES HALLEY'SCHEN KOMETEN

Während des Vorbeifluges am Kometen wurden insgesamt 767 Meßsequenzen durchgeführt. Dies entspricht mehr als 11000 Spektren. Deshalb wurde eine weitgehend automatisierte Datenauswertung angestrebt. Für die grafische Darstellung der Spektren und erste Korrekturen, wie z.B. Ausgleich der Verstärkungsunterschiede der beiden Mikrokanalvervielfacher, wurde ein Programm für einen Personal-Computer erstellt, das gleichzeitig die Daten für die eigentliche Auswertung auf einem Großrechner aufbereitete. Ziel der Auswertung war es, möglichst alle in den Spektren enthaltenen Informationen in einem Rechengang zu gewinnen. Dies wurde durch ein Verfahren erreicht, das im wesentlichen auf einer nichtlinearen Regression beruht. Es wurden drei verschiedene Varianten des Verfahrens entwickelt. Jeweils eine für Ionenspektren und Neutralspektren, sowie eine dritte Variante für Spektren aus dem äußeren Bereich der Koma. Aufgrund der höheren Temperatur in diesem Bereich der Koma ist die Energieverteilung der Teilchen relativ breit, sodaß sich Überlappungen ergeben. Die dritte Variante erlaubt nun, unter Vorgabe der vom Massenanalysator gemessenen Konzentrationen, die Temperatur und Abströmgeschwindigkeit aus den Energiespektren zu bestimmen.

3.1 Die Energieverteilungsfunktion von Teilchen bei der Abbildung im Energie-Analysator

Voraussetzung für die Anwendbarkeit des Auswerte-Verfahrens ist die genaue Kenntnis der theoretischen Energieverteilungsfunktion (Peakform) im Analysator und seiner ionenoptischen Eigenschaften. Wie in Kapitel 2 dargestellt, wird in den verschiedenen Betriebsarten des Instruments jeweils ein Energiebereich quasilinear auf den Detektor abgebildet. Nach der Gleichung für die Energieskala

(Gl. 2.10) ist die Detektorposition (Pixelnummer), auf der ein Ion nachgewiesen wird, proportional zu dessen kinetischer Energie, also proportional zum Quadrat der Relativgeschwindigkeit zwischen Gas und Sonde. Diese ergibt sich aus der Überlagerung der Relativgeschwindigkeit zwischen Sonde und Kometenkern und der Abströmgeschwindigkeit des Gases (Gl.2.3). Die Peakform wird dagegen bestimmt durch die Geschwindigkeitsverteilung in der Kometenatmosphäre, die ionenoptischen Eigenschaften des Instruments und Detektoreigenschaften.

3.1.1 Thermische Energie und Relativgeschwindigkeit

Unter der Annahme thermischen Gleichgewichts in der kometaren Atmosphäre ergibt sich die Geschwindigkeitsverteilung aus der Maxwellverteilung, transformiert durch die Relativgeschwindigkeit zwischen Sonde und Kometenkern. Bezeichnet man die Flugrichtung der Sonde als x -Achse und wählt die bewegte Sonde als Bezugssystem, so ergibt sich für die Geschwindigkeitsverteilung einfach positiv geladener Ionen der Masse m :

$$\frac{dN}{dV} = C * \exp \left\{ -\frac{1}{kT} \left(\frac{m}{2} (V - V_0 - V_F)^2 \right) \right\} \quad (3.1)$$

Hierbei ist V die Geschwindigkeit der Teilchen, V_0 die Geschwindigkeit der Sonde und V_F die Abströmgeschwindigkeit der Ionen. Ausschlaggebend für die Peakform sind die Komponenten der Geschwindigkeit in x -Richtung:

$$\frac{dN}{dV} = C * \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} \left([V_x - V_0 - V_{Fx}]^2 + V_y^2 + V_z^2 \right) \right\} \quad (3.2)$$

Die V_{xyz} sind die transformierten thermischen Geschwindigkeitskomponenten. Der Beitrag der Abströmgeschwindigkeiten der Teilchen zur y - und z -Richtung wurde vernachlässigt. Integriert man über V_y und V_z so erhält man:

$$\frac{dN}{dV} = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} (V_x - V_0 - V_{Fx})^2 \right\} \quad (3.3)$$

Um die Teilchen pro Energieintervall zu erhalten, muß man noch dV in dE umwandeln und erhält:

$$\frac{dN}{dE} = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp \left\{ -\frac{m}{2kT} \left(\frac{\sqrt{E}}{\sqrt{m/2}} - V_0 - V_{Fx} \right)^2 \right\} \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (3.4)$$

Da man von radialem Abströmen der Teilchen ausgeht, muß man insbesondere bei kernnahen Spektren die Abströmgeschwindigkeit mit einem Faktor $\cos(\alpha)$ multiplizieren, wobei α der Winkel zwischen Radiusvektor und Flugvektor der Sonde ist.

Gleichung 3.4 gilt streng nur für neutrale Teilchen. Bei Ionen müßte man eigentlich noch berücksichtigen, daß die Sammelrate innerhalb des Akzeptanz-Raumwinkels außerdem noch proportional zu V ist (d.h. Teilchen mit antiparalleler Geschwindigkeit werden effektiver gesammelt als solche mit paralleler). Da jedoch die thermischen Geschwindigkeiten klein gegen die Relativgeschwindigkeit sind ($< 1\%$), ist dies vernachlässigbar.

3.1.2 Instrumentelle Einflüsse

Die so erhaltene theoretische Peakform wird noch durch die ionenoptischen Eigenschaften des Analysators und Detektoreigenschaften verändert. So liefert der Detektor kein kontinuierliches, sondern aufgrund seiner 128 Anoden (Pixel) ein diskretes Spektrum, wobei jedem Pixel ein gewisses Energieintervall (zwischen 4 eV und 10 eV je nach Energiebereich) entspricht. Wesentlichen Einfluß hat auch die endliche Breite des Objektschlitzes, die eine Peakverbreiterung bewirkt. Bei einer Schlitzbreite von 0.2 mm beträgt die Bildbreite, die exakt monoenergetische Teilchen auf dem Detektor erzeugen würden, 0.6 mm (Green und Proca 1970 [20]). Dies entspricht 1.5 Pixel. Berechnungen der Trajektorien entlang der optischen Achse, gekoppelt mit Potentialfeldrechnungen, die die Geometrie des Analysators berücksichtigen, ergaben eine Bildbreite der Abbildung des Eintrittsschlitzes auf den Detektor von 1.7 Pixel (Anweiler 1986 [21]). Mathematisch läßt sich der Einfluß des Objektschlitzes auf die Peakform durch eine Faltung der Energieverteilung $F(E)$ der Teilchen mit der Schlitzfunktion (Rechteck) beschreiben.

$$F^*(E) = \int F(E - s) * F_{\text{Schlitz}}(s) ds \quad (3.5)$$

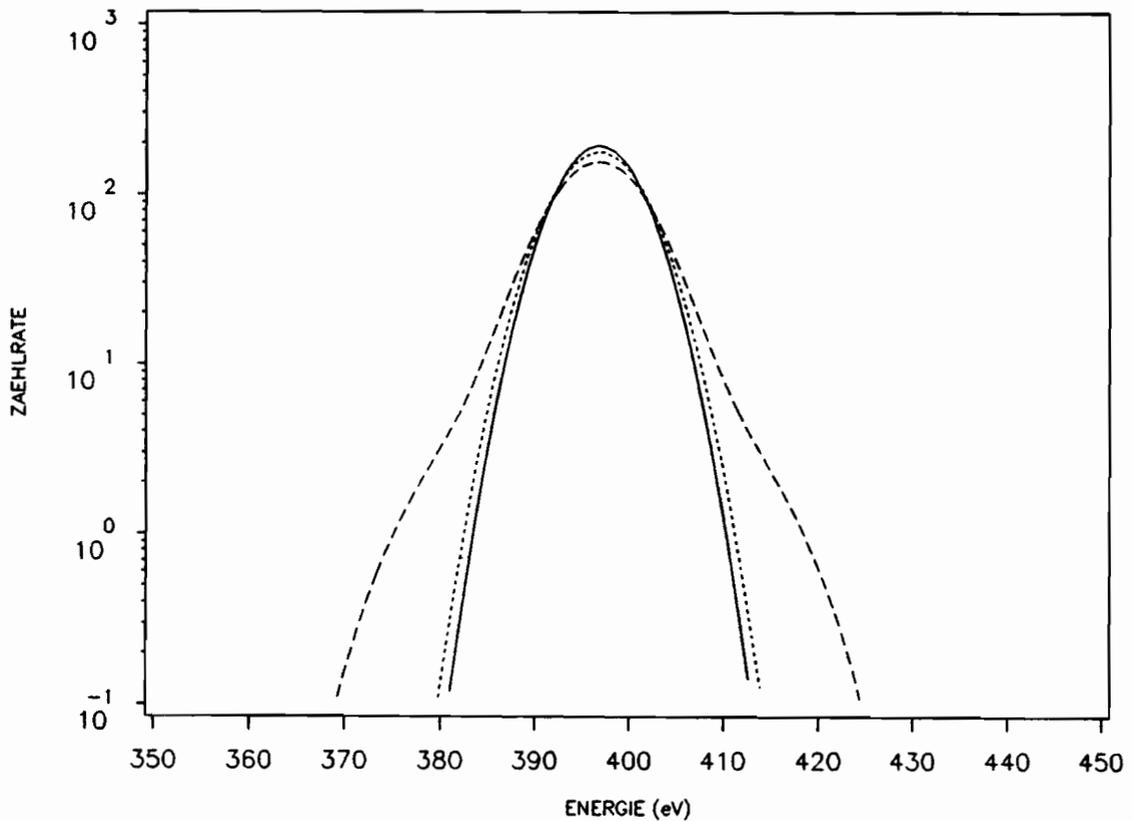


Abbildung 3.1: Die Peakform und der Einfluß der Faltungsoperationen. Die durchgezogene Linie zeigt die Peakform aufgrund einer Geschwindigkeitsverteilung, die unterbrochenen Linien den Einfluß der Faltungsoperationen. Einfluß des Objektschlitzes (punktierte Kurve). Einfluß der Detektorfunktion (gestrichelte Linie). Angenommene Parameter: Masse 16 AME, Temperatur: 250 K, Abströmgeschwindigkeit: 805 m/s

Eine weitere Modifikation der Peakform ergibt sich aus Detektoreigenschaften. Durch die große Verstärkung der MCP's kommt es an ihren Ausgängen zu Raumladungseffekten, die eine zusätzliche Verbreiterung der Peakbasis bewirken. Die exakte rechnerische Behandlung dieses Effektes ist schwierig. Diese Verbreiterung läßt sich jedoch mit einer empirischen Funktion, die anhand von Eichspektren ermittelt wurde, beschreiben. Es hat sich dabei gezeigt, daß eine weitere Faltung mit der Funktion F_{Detektor} die Kurvenform bis zum 1 % Niveau sehr gut beschreibt.

$$F_{\text{Detektor}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{e}{b}\right)^2} \quad \text{mit } b = 2 \quad (3.6)$$

Abb. 3.1 zeigt die theoretische Peakform und den Einfluß der Faltungsoperationen.

3.2 Die Aufbereitung der Rohdaten

Die Aufbereitung der Rohdaten wurde anhand der grafischen Darstellung der Spektren in folgenden Schritten durchgeführt.

- Ausgleich der Nichtlinearität.
- Ausgleich der relativen Empfindlichkeit.
- Abzug des Meßuntergrundes (bei Ionenspektren).
- Festlegen der Massenskala und Bestimmung der Zählraten der einzelnen Massen.
- Bestimmung von groben Startwerten für Temperatur und Abströmgeschwindigkeit.

Für die Korrektur der Nichtlinearität NL liegen für jedes MCP und für jede Verstärkungsstufe (Gainstep) die Parameter Startwert, Steigung A und Achsenabschnitt B (siehe Gleichung 2.14) vor. Ist die Zählrate größer als der Startwert wird gemäß Gleichung 2.14 der Nichtlinearitätsfaktor berechnet und die Zählrate korrigiert:

$$Zählrate_{korrr.} = \frac{Zählrate}{NL(Zählrate, Gainstep, MCP)} \quad (3.7)$$

Die Nichtlinearität muß jedoch nur bei wenigen kernnahen Spektren und den Spektren, die bei erhöhter Verstärkung (HG: High Gain) aufgenommen wurden, berücksichtigt werden.

Die relative Empfindlichkeit (RG: Relative Gain) der einzelnen Pixel liegt als zweidimensionales Datenfeld, in Abhängigkeit von Verstärkungsstufe und Pixelnummer, vor. Die Korrektur erfolgt durch Division der Zählrate der einzelnen Pixel durch $RG(Gainstep, Pixelnummer)$.

Der Meßuntergrund setzt sich im wesentlichen aus dem MCP-Untergrund und einer vom Teilchenfluß durch das Instrument abhängigen Komponente zusammen. Der MCP-Untergrund entsteht durch Rauschen in der Elektronik und Spontanemission der MCP's, die bevorzugt an den Enden der MCP's auftritt. Der

MCP-Untergrund ist im allgemeinen vernachlässigbar klein. Die vom Teilchenfluß durch das Experiment abhängige Komponente entsteht hauptsächlich durch Ionisation bei Stößen der kometairen Gase und Ionen mit dem Restgas im Instrument. In den Neutralmodi tragen nur Neutral-Neutralstöße und Elektronei-Stoßionisation des Restgases in der Ionenquelle zum Untergrund bei, da die Ionen am Eintritt ins Instrument gehindert werden. Nimmt man an, daß die Gasdichte in der Koma umgekehrt quadratisch mit dem Abstand r zum Kern abnimmt und daß der Druck im Instrument proportional zu dieser Dichte ist, so ergibt sich eine $1/r^4$ Abhängigkeit des Neutral-Neutral-Stoßuntergrundes. Im Ionenmodus ergibt sich eine zusätzliche Komponente durch Ionen-Neutralstöße. Da jedoch im Ionenmodus die Instrumentempfindlichkeit um den Reziprokwert der Ionisierungswahrscheinlichkeit für das Neutralgas, die in der Größenordnung von 10^{-7} liegt, größer ist, ist das Signal/Stoßuntergrund-Verhältnis im Ionenmodus wesentlich besser. Im Gegensatz zu den Neutralmodi werden im Ionenmodus die am Eintrittsschlitz produzierten Ionen nicht am Eindringen ins Instrument gehindert. Diese können daher einen zusätzlichen Beitrag zum Untergrund liefern.

Da die Untergrund-Spektren entweder vor oder nach dem eigentlichen Spektrum aufgenommen wurden, muß wegen der Zunahme des Untergrundes mit dem Druck das Untergrundspektrum durch Multiplikation mit einem Faktor dem zu korrigierenden Spektrum angepaßt werden. Bei Ionenmessungen wurde dies, wegen der starken Variabilität des Untergrundes nahe am Kometen, anhand der grafischen Darstellung interaktiv am Bildschirm durchgeführt. Für die Neutralspektren wurden gemittelte Untergrundspektren erstellt und der jeweilige Faktor erst bei der Regressionsrechnung bestimmt.

3.3 Das Regressionsverfahren

Aus den so aufbereiteten Daten wurden erste grobe Startwerte für die Regression gebildet. Dies sind die Zählraten einzelnen Massenpeaks und je ein Startwert für die Abströmgeschwindigkeit und für die Temperatur der Ionen bzw. Gase. Aus diesen Startwerten werden nach der in Kap. 3.1 besprochenen Methode theoretische Spektren berechnet. Pro Anodenarray wird an 641 Stützstellen (0.1 Pixel) die Amplitude im Spektrum bestimmt, wobei diese die Summe der Funktionswerte für alle Massen bei dieser Energie ist. In diesem Raster von 641 Punkten werden die Faltungsoperationen (Objektschlitz, Detektorverzerrungen) als

diskrete Faltungssumme durchgeführt. Anschließend wird zwischen je 11 Stützstellen integriert (Simpson-Methode). Die dabei gewonnenen Werte werden als theoretische Funktionswerte in das Regressionsprogramm eingeführt. Das verwendete Verfahren beruht auf einer nichtlinearen Regression, d.h. Aufgabe des Programms ist die Minimierung der Quadrate der Abweichungen zwischen gemessenem und berechnetem Spektrum:

$$\Phi = \sum (I_{obs} - I_{th})^2$$

Unter Ausnützung der partiellen Ableitungen werden die Startparameter verändert, ein neues theoretisches Spektrum berechnet und Φ neu bestimmt. Die Iteration wird abgebrochen, wenn der Genauigkeitsgewinn zwischen den letzten beiden Iterationen einen bestimmten Wert unterschreitet. Das Verfahren liefert so in einem Rechengang die Dichten der einzelnen Massen, sowie die Temperatur und die Abströmgeschwindigkeit der Gase bzw. Ionen. Eine ausführliche Beschreibung des Verfahrens findet man in der Arbeit von Pitha und Jones 1966 [22]. Aus dieser Arbeit wurde die Methode 5 verwendet, die sich durch besonders schnelle Konvergenz auszeichnet.

3.4 Ergebnisse

Die Ionenmessungen ergaben, daß man in der inneren Koma zwei Bereiche unterscheiden kann, die sich durch eine unterschiedliche Energieverteilung der Ionen auszeichnen. Die Grenze zwischen diesen beiden Bereichen bildet eine schmale Übergangszone, die Kontaktfläche. Außerhalb der Kontaktfläche sind die vom Kern abströmenden Gase und Ionen dem Sonnenwind und dem von ihm mitgeführten Magnetfeld ausgesetzt. An der Kontaktfläche ist der Sonnenwind so weit abgebremst, daß er nicht weiter vordringen kann. Innerhalb der Kontaktfläche ist das Magnetfeld praktisch gleich Null (Neubauer et al. 1986 [23]); die kometaren Ionen können wie die Gase frei abströmen. Die Kontaktfläche zeichnet sich durch eine abrupte Änderung in der Energieverteilung der Ionen aus. Innerhalb ist das Plasma „kalt“, etwa 200 K, und ist über Stoßprozesse mit dem Gas im thermischen Gleichgewicht während an der Kontaktfläche die Iontemperatur um etwa 1000K (Lämmerzahl et al. 1987 [8]) steigt. In Abb. 3.2 zeigen zwei Spektren des Energie-Analysators den drastischen Unterschied in

der Energieverteilung der Ionen innerhalb und außerhalb der Kontaktfläche. Die Kontaktfläche befand sich, entlang der GIOTTO -Bahn, etwa in 4500 ± 200 km Entfernung vom Kometenkern. Innerhalb der Kontaktfläche zeigten alle Energiespektren der Ionen „kaltes“ Plasma. Fast auf allen Massenpositionen von 12 bis 56 AME/e (obere Grenze im Ionenmodus) zeigten sich aufgelöste Peaks.

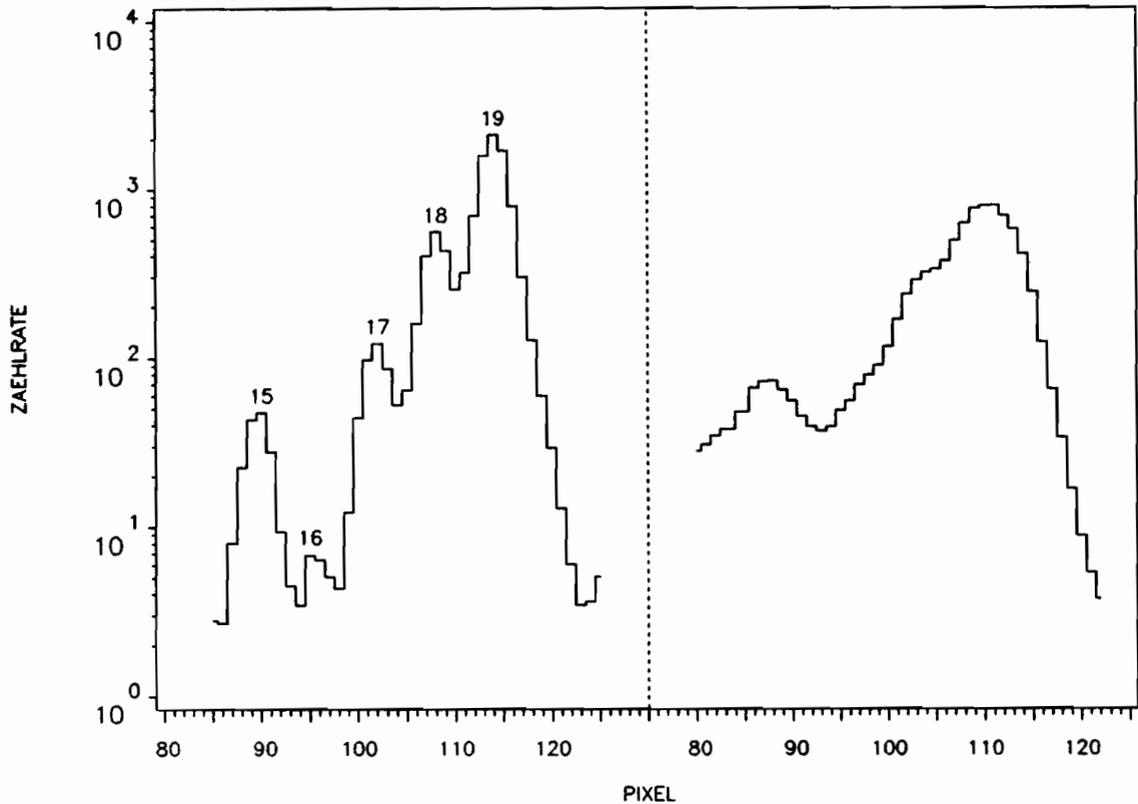


Abbildung 3.2: Energiespektren der Ionen der Wassergruppe innerhalb (3993 km) und außerhalb der Kontaktfläche (4782 km Abstand zum Kern).

Die Analyse der Spektren wurde für die beiden MCP's getrennt durchgeführt. Für die Ionenmessungen ergaben sich so drei Massenbereiche (11–21 AME, 22–37 AME, 38–56 AME). Bei der Bestimmung der Temperatur und der Abströmgeschwindigkeiten wurde angenommen, daß innerhalb eines solchen Spektralbereichs gemeinsame Werte für Temperatur und Abströmgeschwindigkeit vorliegen, was für Teilchen im thermischen Gleichgewicht sicher gilt. Aufgrund der Regression gehen jedoch bei der Bestimmung der Temperatur nicht alle Peaks mit dem gleichen Gewicht ein. Ein guter „Fit“ bei einem dominanten Peak ist für die Minimierung der Gesamtabweichung günstiger d.h. dominante Spezies gehen mit einem größeren Gewicht ein.

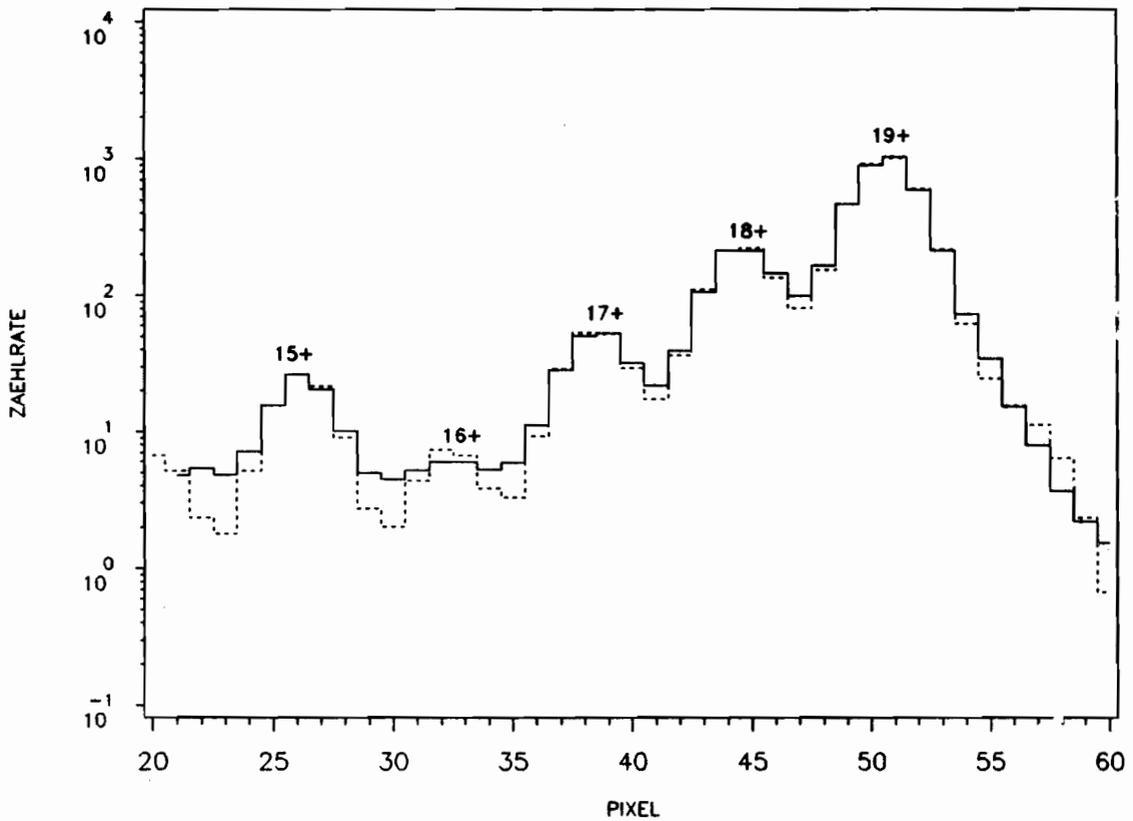


Abbildung 3.3: Vergleich zwischen einem gemessenen (durchgezogene Treppenkurve) und dem dazu berechneten Spektrum (unterbrochene Kurve).

Abb. 3.3 zeigt, in einem Vergleich, ein gemessenes Ionenspektrum (durchgezogene Treppenkurve) und ein berechnetes Spektrum (unterbrochene Kurve) des Massebereichs 15–20 AME. Aufgetragen sind der Logarithmus der Zählrate über AME/e. Die Übereinstimmung ist sehr gut, lediglich bei sehr großen Sprüngen in der Dynamik (Massen 19–20 AME) wird die kleinere Intensität zu groß bestimmt.

3.4.1 Ionen-Temperaturen

Die Temperatur läßt sich aus der Peakbreite bestimmen. Je höher die Temperatur, umso größer ist die Peak-Halbwertsbreite (*PHB*). Der genaue Zusammenhang ergibt sich zu:

$$PHB(eV) = 2 \left(\left(\sqrt{5.973 * 10^{-5} * T} + \sqrt{E_0} \right)^2 - E_0 \right) \quad (3.8)$$

Hierbei ist T die Temperatur und E_0 die masseabhängige Energie in eV (siehe Gl. 2.2).

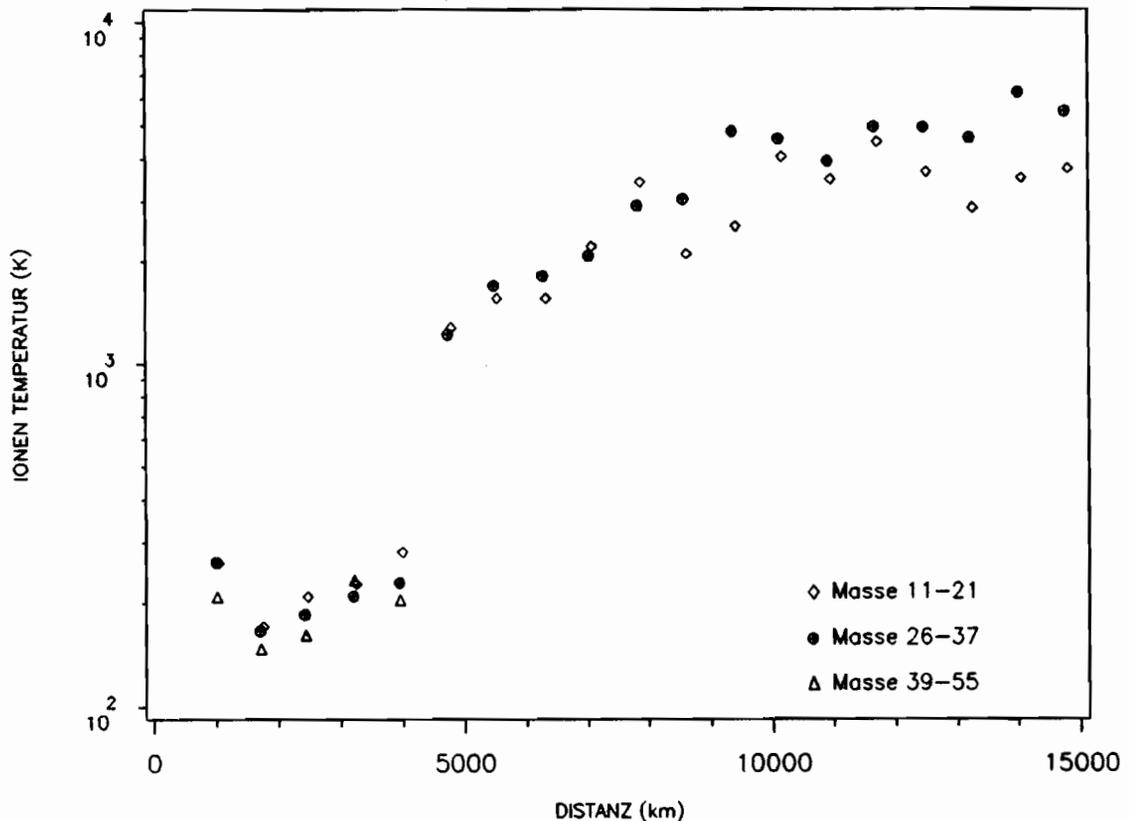


Abbildung 3.4: Temperatur der Ionen in Abhängigkeit vom Abstand zum Kern, gewonnen aus drei unterschiedlichen Spektralbereichen. Deutlich ist der sprunghafte Anstieg der Temperatur nahe der Kontaktfläche (bei 4500 km) zu sehen.

Abb. 3.4 zeigt das Temperaturprofil der Ionen, das aus drei unterschiedlichen Spektralbereichen gewonnen wurde. Die Abweichungen zwischen den Ergebnissen der drei Masse-Bereiche (Wassergruppe, 26–35 AME, 40–50 AME) liegen innerhalb des, anhand von Eichspektren, abgeschätzten Fehlers von etwa 80 K (für

den „kalten“ Bereich), wobei die relative Genauigkeit wahrscheinlich besser ist. Innerhalb der Kontaktfläche steigt die Temperatur mit der Distanz langsam von 180 auf 250 K. An der Kontaktfläche steigt die Temperatur plötzlich um 1000 K, nimmt danach stetig weiter zu und erreicht 4000 K bei etwa 10000 km Abstand vom Kern des Kometen. Der Datenpunkt bei etwa 1000 km weicht vom generellen Trend ab. Grund hierfür könnte eine Abweichung von der sphärischen Symmetrie nahe am Komet sein.

3.4.2 Abström-Geschwindigkeit

Die Bestimmung der Abströmgeschwindigkeit der Ionen ist nur innerhalb der Kontaktfläche mit guter Genauigkeit möglich. Jenseits der Kontaktfläche sind die einzelnen Massenpeaks aufgrund der hohen Temperatur nicht mehr aufgelöst. Die Analyse der Ionenspektren, mit einem anderen Auswerteverfahren, ergab eine mittlere radiale Abströmgeschwindigkeit von $806 \text{ m/s} \pm 50 \text{ m/s}$ innerhalb der Kontaktfläche und $0 \text{ m/s} \pm 300 \text{ m/s}$ außerhalb der Kontaktfläche (Lämmerzahl et al. 1987 [8]). Bei Neutralspektren ergibt sich bei der Bestimmung der Abströmgeschwindigkeit der Gase eine systematische Abweichung. Dieser „Offset“ wird durch Raumladung in der Ionenquelle am Ort des Elektronenstrahls verursacht. Man kann jedoch in der magnetfeldfreien und von Stößen dominierten Koma innerhalb der Kontaktfläche davon ausgehen, daß neutrale und ionisierte Teilchen mit der gleichen Geschwindigkeit abströmen (Körösmezei et al. 1987 [40]). In Abb. 3.5 ist die Abströmgeschwindigkeit der neutralen Teilchen der Wassergruppe über dem Abstand zum Kern aufgetragen. Die Geschwindigkeiten wurden der Ionengeschwindigkeit von 806 m/s angepaßt. Die Wassergruppe ist bis zu einer Entfernung von 16000 km in ausreichender Intensität vorhanden. Mit abnehmender Dichte wird jedoch die Streuung in den Ergebnissen immer größer. Die mit dem Regressionsverfahren bestimmten Abströmgeschwindigkeiten stimmen, innerhalb der Fehlergrenzen, sehr gut mit denen von Lämmerzahl et al. 1987 [8] überein.

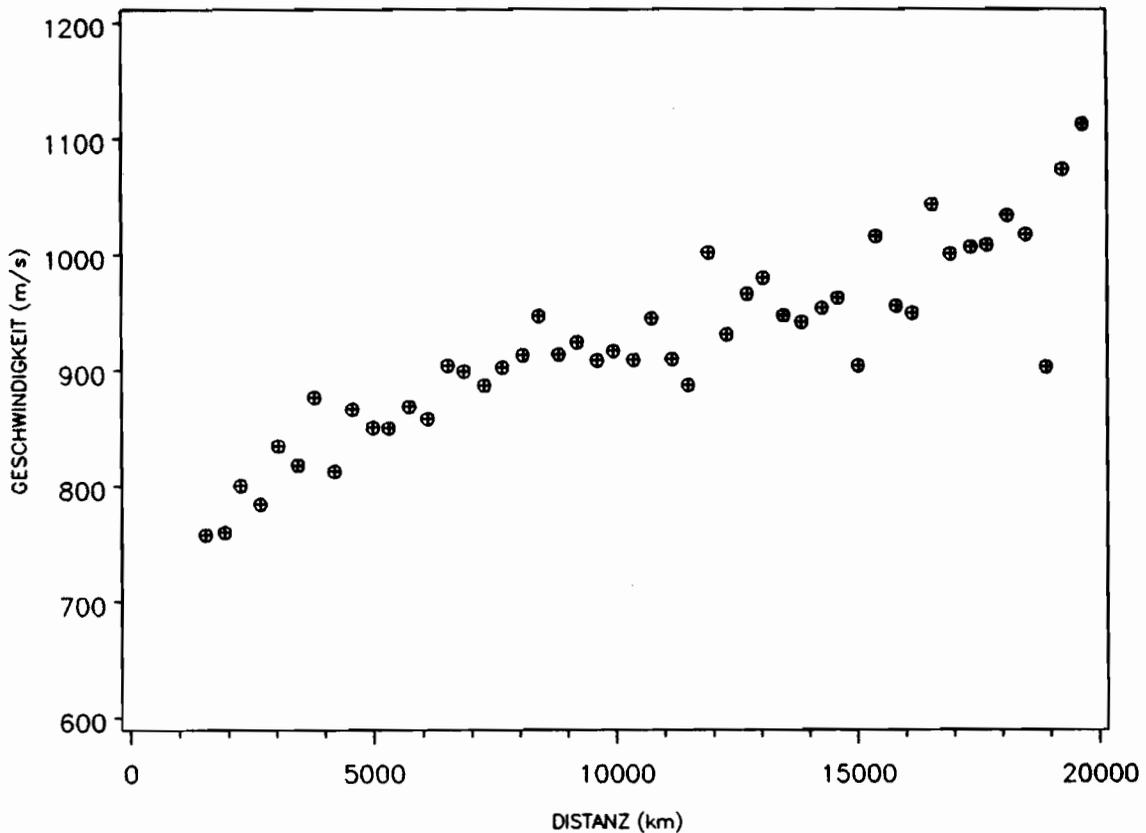


Abbildung 3.5: Abströmgeschwindigkeiten der Gase (Wassergruppe) in Abhängigkeit vom Abstand zum Kern. Die Daten wurden auf die Geschwindigkeiten der Ionen (806 m/s innerhalb der Kontaktfläche) normalisiert.

3.4.3 Partialdichten

Abb. 3.6 zeigt die Ionendichteprofile der Massen 15–19 AME innerhalb der Kontaktfläche. Aufgetragen ist der Logarithmus der Teilchendichte über der Entfernung zum Kometenkern. Die Ionen dieses Massenbereichs sind die häufigsten nahe am Kometen. Andere häufige Ionen sind die der Massen 12 AME, 26 AME, 31–33 AME und 45 AME. Häufigstes Ion der Wassergruppe ist das der Masse 19 AME, gefolgt von den Ionen der Massen 18 AME, 17 AME und 15 AME. Die geringste Dichte erreichen die Ionen der Masse 16 AME. Die Datenpunkte bei etwa 1000 km wurden aus einem Spektrum ermittelt, das aufgrund der hohen Teilchendichte bei dieser Distanz einen hohen Untergrundanteil hatte, wodurch die Analyse erschwert wird. Dieses kurz vor der größten Annäherung an den Kern aufgenommene Spektrum zeigt auch hinsichtlich der Abströmgeschwindigkeit und der Temperatur vom allgemeinen Trend abweichende Charakteristika. Dies könnte darauf hindeuten, daß einige der getroffenen Annahmen im kernna-

hen Gebiet nicht mehr erfüllt sind (z.B. Zerstörung der sphärischen Symmetrie durch 'Jets'). Die relativ starke Änderung der Dichte der Masse 16 AME bei 4000 km Kernabstand ist wahrscheinlich auf eine Überkorrektur beim Abzug des Meßuntergrundes zurückzuführen. Massen mit geringer Dichte reagieren besonders empfindlich auf die Subtraktion des Untergrundes. Die aus den Energiespektren ermittelten Ionendichten stimmen innerhalb der Fehlergrenzen mit den vom Massenanalysator gemessenen Ionendichten überein.

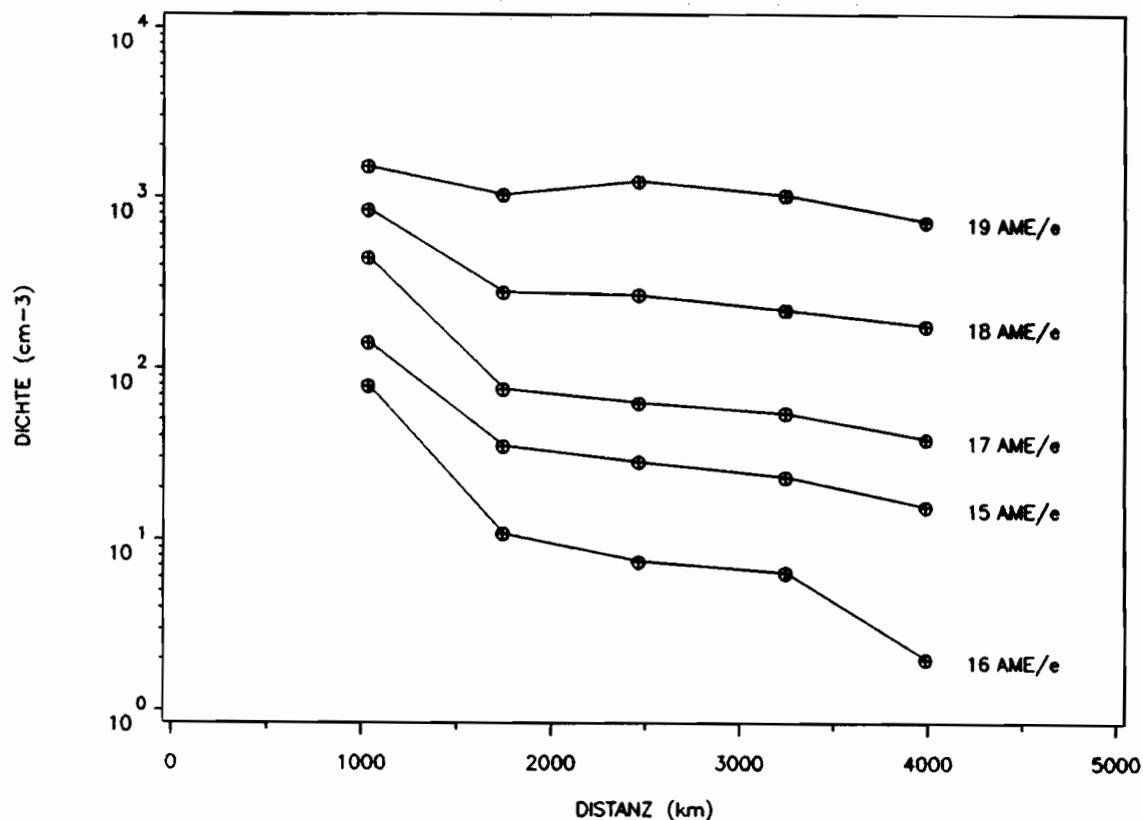


Abbildung 3.6: Dichteverlauf der Ionen der Massen 15 AME bis 19 AME innerhalb der Kontaktfläche. Nähere Erläuterungen im Text.

Die Masse 19 AME läßt sich eindeutig als H_3O^+ identifizieren. Die anderen Massen 15 – 18 AME können jeweils verschiedene Komponenten (CH_n^+ , NH_n^+ , H_2O^+ , OH^+ , O^+) haben. Die in Abb. 3.6 gezeigten Meßergebnisse bilden die Ausgangsbasis für die in Kap. 4 beschriebenen Modellrechnungen zur Bestimmung der jeweiligen Anteile.

3.5 Fehlerbetrachtung

Wie bereits in Kapitel 2. erwähnt, beträgt der Fehler aufgrund der Datenreduktion von 12 auf 8 Bit 3.3%. Bei geringen Teilchendichten muß man noch den statistischen Charakter des Nachweisprozesses berücksichtigen. Für Ionenmessungen spielt dies allerdings eine untergeordnete Rolle. Einer gemessenen Dichte von einem Teilchen pro cm^3 entsprechen pro Spektrum einige 10^4 gezählte Ionen. Der Fehler aufgrund Zählstatistik ist demnach kleiner als 1% (2σ). Bei Neutralspektren werden jedoch nur die Teilchen nachgewiesen, die in der Ionenquelle ionisiert wurden. Die Ionisierungswahrscheinlichkeit hängt von der Gasart ab und liegt in der Größenordnung von 10^{-5} . Dies bedeutet, daß die Zählstatistik bei vergleichbarer Dichte um diesen Faktor schlechter ist. Bei einer gemessenen Teilchendichte von Wasser von $4.7 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ in 1000 km Abstand beträgt der Fehler aufgrund der Zählstatistik etwa 9% (2σ). Die Minimierung der Quadrate der Abweichung zwischen gemessenen und theoretischen Werten bei der Regressionsrechnung bewirkt, daß hohe Intensitäten genauer bestimmt werden als geringe. Der zusätzliche Fehler, der sich aus der Regression ergibt, kann für Neutralspektren vernachlässigt werden, während er bei Ionenmessungen bei sehr geringen Dichten berücksichtigt werden muß. Zusammen mit der Genauigkeit, mit der die Detektorverstärkung und die relative Verstärkung der einzelnen Pixel kalibriert wurde, beträgt der Gesamtfehler für die im folgenden verwendeten Ionendichten der Massen 15 - 19 AME 18 %.

4 INTERPRETATION DER MESSERGEBNISSE MIT HILFE EINES KOMAMODELLS

Von den gemessenen Partialdichten der Ionen im Massebereich 15-19 AME läßt sich nur die Masse 19 AME eindeutig einem Ion, nämlich H_3O^+ , zuordnen. Die hohe Partialdichte des H_3O^+ zeigt, daß Wasser der dominierende Bestandteil der Koma sein muß. Da jedoch das leichteste Tochterprodukt des Wassers, sieht man vom Wasserstoff ab, das Ion des Sauerstoffs (16 AME) ist, beweist die Masse 15 AME die Anwesenheit anderer Muttermoleküle. Die beiden einfachsten potentiellen Muttermoleküle, die aus C-, H- und N- Atomen bestehen und im betrachteten Massebereich Beiträge liefern können, sind Methan (CH_4) und Ammoniak (NH_3). Tochterprodukte von beiden (CH_3^+ , NH^+) können zur Masse 15 AME beitragen. Aus der Tatsache, daß die Partialdichte der Masse 15 AME höher ist als die der Masse 16 AME, kann man schließen, daß der überwiegende Anteil der Masse 15 AME CH_3^+ sein muß. Dies liegt daran, daß alle NH_n^+ ($0 \leq n \leq 3$) mit Wasser, dem Hauptbestandteil der Koma, reagieren (siehe Reaktionen 75, 77, 119, 125, 126, 127, 130, 131 im Anhang 7.1). Für NH_3 -Derivate muß man also erwarten, daß mit abnehmendem n die Partialdichten geringer werden d.h. die Dichte von NH_2^+ (16 AME) müßte höher sein als die von NH^+ (15 AME). Anders ist dies bei den Tochterionen des Methans CH_n^+ ($0 \leq n \leq 5$). Das Methylkation CH_3^+ reagiert nicht mit Wasser und kann sich deshalb „anhäufen“. Dank diesem „glücklichen Umstand“ kann man die Masse 15 AME im wesentlichen als CH_3^+ identifizieren, geringe Anteile von NH^+ sind jedoch nicht auszuschließen. Einen Nachweis für Ammoniak zu finden ist schwieriger. Die Aussagekraft der Partialdichten der Massen 14 bis 17 AME ist gering. Da Wasser der dominierende Bestandteil der Koma ist, haben die Massen 16 AME und 17 AME (NH_2^+ , NH_3^+) hohe Beiträge von O^+ und OH^+ . Hauptbestandteil der Masse 15 AME ist, wie oben gezeigt, CH_3^+ und die Masse 14 AME (N^+) hat mögliche Beiträge von CH_2^+ , so daß geringe Anteile von NH_3 schwierig zu identifizieren sind. Die Anwesenheit von NH_3 würde jedoch die höheren Massen 18 AME und 19 AME

beeinflussen, da es mit H_3O^+ zu NH_4^+ reagiert, d.h. mit zunehmender NH_3 -Konzentration wird sich das Verhältnis der Massen 18 AME zu 19 AME zugunsten der Masse 18 AME verschieben. So ist in der Tat das gemessene Verhältnis der Massen 18/19 AME für eine reine Wasseratmosphäre zu hoch. Dies kann jedoch nur dann als Beweis für eine vorhandene NH_3 -Konzentration gelten, wenn man ausschließen kann, daß andere Muttermoleküle nicht den gleichen Effekt bewirken. Allgemein kann man jedoch davon ausgehen, daß eventuelle andere Muttermoleküle bzw. deren Tochterprodukte die mit H_3O^+ reagieren, dies auch mit H_2O^+ tun werden. Das gilt auch für NH_3 , aber beide Reaktionen führen zum NH_4^+ (18 AME). Als System mit ungerader Elektronenzahl ist H_2O^+ sogar etwas reaktiver als H_3O^+ . Das höhere Ionisierungspotential von H_2O^+ führt dazu, daß es mit einer größeren Anzahl von Molekülen Ladungsaustausch machen kann. D.h. andere Muttermoleküle würden hauptsächlich die Partialdichten beider Massen 18 AME und 19 AME senken. Wenn sie das Verhältnis 18/19 AME überhaupt beeinflussen, dann in einem sehr geringen Maß zugunsten der Masse 19 AME. Das bedeutet, wenn man die Anteile der verschiedenen Spezies zu den Partialdichten der Massen 15 bis 19 AME bestimmen kann, sollte man Angaben hinsichtlich der relativen Konzentrationen von Ammoniak und Methan machen können. Tabelle 4.1 zeigt mögliche Ionen die zum Massenspektrum im Bereich 15 - 19 AME beitragen (Isotope sind nicht berücksichtigt).

Masse	Muttermolekül		
	H_2O	NH_3	CH_4
19 AME	H_3O^+		
18 AME	H_2O^+	NH_4^+	
17 AME	OH^+	NH_3^+	CH_5^+
16 AME	O^+	NH_2^+	CH_4^+
15 AME		NH^+	CH_3^+

Tabelle 4.1: Ionen des Massebereichs 15 AME bis 19 AME

Mit quantitativer Kenntnis der in der Koma ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse sollte es möglich sein, die Zusammensetzung der Massen 15 AME bis 19 AME zu bestimmen.

4.1 Physikalische und chemische Prozesse in der Kometenkoma

Während der sichtbare Teil des Sonnenspektrums hauptsächlich zur Gasproduktion des Kerns führt, ist es der ultraviolette Anteil, der hochreaktive Radikale und Ionen erzeugt, die für die chemischen Reaktionen in der Koma verantwortlich sind. Reaktionen unter Muttermolekülen oder Neutral-Neutral-Reaktionen unter Radikalen sind bei den gemessenen Temperaturen aufgrund der aufzubringenden Aktivierungsenergie sehr langsam. Dreierstoß-Reaktionen (Neutral-Neutral-Ion) sind wegen der geringen Gasdichte unbedeutend. Man kann im wesentlichen drei Reaktionstypen unterscheiden: photolytische Reaktionen, Rekombinations-Reaktionen und Ionen-Molekül-Reaktionen. Auslösendes Moment für die photolytischen Reaktionen ist die Absorption eines Strahlungsquants durch ein Molekül. Je nach Energie des absorbierten Photons sind drei Prozesse möglich. Das Molekül wird dissoziiert (Photodissoziation), es wird ionisiert (Photoionisation) oder es wird, bei Absorption eines EUV-Photons, in einen angeregten Zustand ionisiert, aus dem das Molekülion durch Dissoziation zerfällt (photodissoziative Ionisation). Die Geschwindigkeiten und Häufigkeiten dieser Reaktionen sind abhängig vom Absorptions-Wirkungsquerschnitt, vom Strahlungsfluß im Wellenlängenbereich oberhalb der Mindestenergie für den jeweiligen Prozess und von der Konzentration des Moleküls. Kennt man Wirkungsquerschnitt und Strahlungsfluß, so kann man die Reaktion analog einer chemischen Reaktion betrachten und eine Reaktionsrate R definieren:

$$R = -\frac{d[A]}{dt} = k * [A] \quad (4.1)$$

$[A]$:Konzentration von A in Teilchen pro cm^3 .

Hierbei ist k die Geschwindigkeitskonstante oder der Ratenkoeffizient der Reaktion. Für den Ratenkoeffizienten k gilt:

$$k = \int \sigma(\lambda) * J(\lambda) * d\lambda \quad (4.2)$$

$\sigma(\lambda)$:Wirkungsquerschnitt, $J(\lambda)$:Photonenfluß, λ :Wellenlänge

Die Ratenkoeffizienten für die nicht abgeschwächte solare Strahlung in einer Entfernung von 1 AE von der Sonne findet man tabelliert (Huebner 1985 [24]).

Bei den Rekombinations-Reaktionen kann man zwei Prozesse unterscheiden. Dies sind die einfache Rekombination, der Umkehrprozess zur Photoionisation, und die dissoziative Rekombination. Die einfache Rekombination ist nur für atomare Ionen von Bedeutung. Erheblich größere Ratenkoeffizienten findet man bei der dissoziativen Rekombination, bei der die Rekombination eines Ions mit einem Elektron zur Dissoziation des entstandenen Moleküls führt. Wegen der Coulombwechselwirkung zwischen Elektron und Ion hat dieser Prozess einen großen Wirkungsquerschnitt. Dieser, und damit auch der Ratenkoeffizient, ist umgekehrt proportional zur Relativgeschwindigkeit zwischen Ion und Elektron d.h. umgekehrt proportional zur Wurzel aus der Elektronentemperatur.

$$k(T_e) = k_{300K} * \sqrt{\frac{300K}{T_e}} \quad (4.3)$$

Die Reaktionsraten sind in diesem Fall auch von der Elektronendichte abhängig. Für die Berechnungen wurde eine konstante Elektronen-Temperatur von 250 K angenommen. Dies ist wahrscheinlich für Entfernungen unter 1000 km zu hoch. Solange sie aber nicht um mehr als 100 K abweicht, kann man diese Vernachlässigung machen.

Eine Vielzahl von Reaktionen sind unter den durch die oben beschriebenen Prozesse erzeugten Radikalen und Ionen und den Muttermolekülen möglich. Reaktionspartner sind hierbei immer ein Ion und ein neutrales Teilchen. Ein Sonderfall der Ionen-Molekül-Reaktionen sind die Ladungsaustausch-Reaktionen bei denen die Reaktionspartner lediglich ein Elektron und damit ihre Ladung austauschen. Die Wirkungsquerschnitte dieser Reaktionen sind umso größer je kleiner die Energiedifferenz der elektronischen Zustände der beteiligten Reaktionspartner ist. Befinden sich beide im Grundzustand, so ist diese die Differenz ihrer Ionisierungspotentiale. Die Reaktionsraten hängen nun von der Konzentration beider Edukte ab. In Tabelle 4.2 sind die verschiedenen Prozesse noch einmal aufgeführt. Angegeben sind jeweils die allgemeine Reaktionsgleichung, ein Reaktions-Beispiel, die Gleichung für die Reaktionsraten und die Größenordnung der Ratenkoeffizienten. Die Ratenkoeffizienten findet man in den Arbeiten von Huebner 1985 [24], Huebner und Fikani 1982 [25], Huntress und Anicich 1986 [26] und Marconi und Mendis 1983 [27].

Photodissoziation			
A	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow B + C$
H_2O	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow OH + H$
			$\lambda \leq 186 \text{ nm}$
$R = -\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt} = k * [A]$			$k \approx 10^{-2} - 10^{-8} \text{ s}^{-1}$
Photoionisation			
A	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow A^+ + e^-$
H_2O	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow H_2O^+ + e^-$
			$\lambda \leq 98.4 \text{ nm}$
$R = -\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[e^-]}{dt} = \frac{d[A^+]}{dt} = k * [A]$			$k \approx 10^{-7} \text{ s}^{-1}$
Photodissoziative Ionisation			
A	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow B^+ + C + e^-$
H_2O	$+$	$h\nu$	$\longrightarrow OH^+ + H + e^-$
			$\lambda \leq 68.4 \text{ nm}$
$R = -\frac{d[A]}{dt} = \frac{d[B^+]}{dt} = \frac{d[C]}{dt} = \frac{d[e^-]}{dt} = k * [A]$			$k \approx 10^{-7} - 10^{-9} \text{ s}^{-1}$
Rekombination			
A^+	$+$	e^-	$\longrightarrow A + h\nu$
H^+	$+$	e^-	$\longrightarrow H + h\nu$
$R = -\frac{d[A^+]}{dt} = -\frac{d[e^-]}{dt} = \frac{d[A]}{dt} = k * [A^+] * [e^-]$			$k \approx 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Dissoziative Rekombination			
A^+	$+$	e^-	$\longrightarrow B + C$
H_3O^+	$+$	e^-	$\longrightarrow OH + H_2$
$R = -\frac{d[A^+]}{dt} = -\frac{d[e^-]}{dt} = \frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt} = k * [A^+] * [e^-]$			$k \approx 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Ladungsaustausch Reaktionen			
A^+	$+$	B	$\longrightarrow B^+ + A$
H_2O^+	$+$	NH_3	$\longrightarrow NH_3^+ + H_2O$
$R = -\frac{d[A^+]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[B^+]}{dt} = \frac{d[A]}{dt} = k * [A^+] * [B]$			$k \approx 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$
Ionen-Molekül-Reaktionen			
A^+	$+$	B	$\longrightarrow C^+ + D$
H_2O^+	$+$	H_2O	$\longrightarrow H_3O^+ + OH$
$R = -\frac{d[A^+]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C^+]}{dt} = \frac{d[D]}{dt} = k * [A^+] * [B]$			$k \approx 10^{-9} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$

Tabelle 4.2: Die allgemeinen Reaktionsgleichungen der physikalischen und chemischen Prozesse mit Beispiel-Reaktionen, Gleichungen für die Reaktionsraten und die Größenordnung der Ratenkoeffizienten.

4.2 Beschreibung des Koma-Modells

In den letzten Jahren wurden zahlreiche Arbeiten veröffentlicht (Marconi und Mendis 1983 [27], Giguere und Huebner 1978 [28], Huebner 1985 [24]), die sich mit der Modellierung von kometaren Atmosphären beschäftigen. Zahlreiche dazu benötigte Daten (z.B. Ratenkoeffizienten für die verschiedenen Reaktionen) waren durch Labormessungen zugänglich oder wurden abgeschätzt. Über andere wichtige Parameter (z.B. Größe und Albedo des Kometenkerns) lagen nur Abschätzungen vor. Viele dieser Parameter sind nun durch die Kometenmissionen (insbesondere durch die „nahen“ Vorbeiflüge von GIOTTO, Vega 1 und Vega 2) bekannt oder können durch andere gleichwertige Daten, über die nun Messungen vorliegen, ersetzt werden. Waren bisher Temperaturen in der Koma und Abströmgeschwindigkeit des Gases Ergebnisse dieser Modellrechnungen, die letztendlich auf Abschätzungen (z.B. der Albedo, optische Dicke der Koma) beruhten oder aus optischen Beobachtungen abgeleitet wurden, so sind diese Daten nun durch in situ Messung bekannt und können zu Modellrechnungen herangezogen werden. Über zwei wichtige Parameter liegen jedoch keine in situ Messungen vor. Dies sind die Elektronentemperatur und der solare Strahlungsfluß im UV-Bereich. Die Elektronentemperatur beeinflusst die Ratenkoeffizienten für die dissoziative Rekombination (siehe Gl. 4.3) und der Strahlungsfluß bestimmt die Ionisations- und Dissoziationsraten.

Die Gültigkeit des im folgenden beschriebenen Modells beschränkt sich auf die Koma innerhalb der Kontaktfläche, da die Wechselwirkung mit dem Sonnenwind nicht berücksichtigt wurde. Ausgehend von einem Gasgemisch von Wasser, Ammoniak und Methan, das von der Oberfläche des Kerns abströmt, wird der Einfluß der unter 4.1 beschriebenen Prozesse auf diese „ursprüngliche“ Atmosphäre berechnet. Nahe an der Kernoberfläche ist die kometare Atmosphäre für die solare UV-Strahlung optisch dick. Aufgrund der Expansion des Komagases nimmt die Dichte und damit auch die Opazität der Koma mit steigender Entfernung vom Kometenkern ständig ab. Dadurch wird das kometare Gas zunehmend der solaren Strahlung ausgesetzt. Die zunehmende UV-Strahlung erzeugt durch die photolytischen Reaktionen immer mehr hochreaktive Radikale und Ionen. Die Konzentrationen werden in Abhängigkeit von der Distanz zum Kometen berechnet. Berechnete Häufigkeiten von Ionenmassen 15–19 AME werden dann mit beobachteten Häufigkeiten verglichen. Durch Variation der Mischungsverhältnisse der Ausgangssubstanzen wird versucht die Übereinstimmung zu verbessern.

4.2.1 Physikalische und chemische Reaktionen

Allein zur Bestimmung des Verhältnisses von Wasser, Ammoniak und Methan muß man bereits ein relativ großes Netzwerk von insgesamt 149 Reaktionen berücksichtigen. Bezogen auf die unter 4.1 beschriebenen Prozesse ergeben sich:

Prozess	Anzahl der Reaktionen
Photodissoziation	14 Reaktionen
Photoionisation	9 Reaktionen
Photodissoziative Ionisation	12 Reaktionen
Dissoziative Rekombination	25 Reaktionen
Rekombination	5 Reaktionen
Ladungsaustausch	27 Reaktionen
Ionen-Molekül-Reaktionen	57 Reaktionen

Die einzelnen Reaktionen mit den dazugehörigen Ratenkoeffizienten sind im Anhang 7.1 aufgelistet. An diesen 149 Reaktionen sind 32 Spezies beteiligt, die in Tab. 4.3 aufgeführt sind.

4.2.2 Das Differentialgleichungssystem

Wie in Kapitel 4.1 beschrieben, läßt sich für jede Reaktion eine Gleichung für die Reaktionsrate formulieren. Da die Reaktionsraten gleich der zeitlichen Ableitung der Konzentrationen der einzelnen an der Reaktion beteiligten Spezies (sowohl Edukte als auch Produkte) sind, läßt sich für die Änderung der Konzentration jeder Spezies eine Differentialgleichung aufstellen:

$$\frac{d[A]}{dt} = \sum R_{ERZEUGUNG} - \sum R_{VERNICHTUNG} - \operatorname{div}([A] \cdot \vec{v}) \quad (4.4)$$

Hierbei sind $R_{ERZEUGUNG}$ die Reaktionsraten der Bildungsreaktionen einer Spezies und $R_{VERNICHTUNG}$ die Reaktionsraten jener Reaktionen, die zum Abbau einer Spezies führen. Der Term $\operatorname{div}([A] \cdot \vec{v})$ beschreibt den Dichteverlust durch das

Neutrale						
Wasser-Gruppe :	H_2O	OH	O	H_2	H	
Methan-Gruppe :	CH_4	CH_3	CH_2	CH	C	
Ammoniak-Gruppe:	NH_3	NH_2	NH	N		
Ionen						
Wasser-Gruppe :	H_3O^+	H_2O^+	OH^+	O^+	H_2^+	H^+
Methan-Gruppe :	CH_5^+	CH_4^+	CH_3^+	CH_2^+	CH^+	C^+
Ammoniak-Gruppe:	NH_4^+	NH_3^+	NH_2^+	NH^+	N^+	
Elektronen :	e^-					

Tabelle 4.3: Die an den Reaktionen beteiligten Spezies.

Abströmen der Teilchen und wird im Rechenformalismus gesondert behandelt. Man erhält so ein System von 32 Differentialgleichungen, das mit geeigneten Methoden numerisch lösbar ist. Die Reaktionsraten und das Differentialgleichungssystem sind im Anhang angegeben.

4.2.3 Lösungsmethode

Das oben beschriebene Differentialgleichungssystem gehört zur Klasse der „steifen“ Systeme, die spezielle Lösungsverfahren erfordern. Steife Differentialgleichungssysteme kennzeichnen komplexe Systeme, die durch sehr unterschiedlich große Koeffizienten (Ratenkoeffizienten) charakterisiert sind. Die um mehrere Größenordnungen differierenden Geschwindigkeitskonstanten führen zu extremen Unterschieden im zeitlichen Verhalten der einzelnen Lösungen. Dies führt bei herkömmlichen numerischen Verfahren (z.B. Standard-Runge-Kutta Verfahren) zu Problemen bei der Bestimmung der Schrittweite. Die einfache Schrittweitensteuerung solcher Verfahren führt dazu, daß der Zeitschritt zu klein gewählt wird. Dies führt zu inakzeptabel langer Rechenzeit oder aufgrund der ständig anwachsenden Rundungsfehler zu falschen Ergebnissen. Es wurde ein Verfahren der Numerical Algorithm Group verwendet, das auf einem von Gear entwickelten Algorithmus beruht (Gear 1971 [29]). Das Verfahren benötigt zusätzlich die partiellen Ableitungen der Differentialgleichungen nach den einzelnen Spezies, die sogenannte Jakobi-Matrix mit in diesem Fall 32 mal 32 Elementen entsprechend

den 32 betrachteten Spezies.

$$Jakobi(i, j) = \frac{\partial \frac{d[K_i]}{dt}}{\partial [K_j]} \quad (4.5)$$

$[K_{i,j}]$:Konzentration der Spezies i bzw. j

Für die Analyse der Reaktionsgleichungen, d.h. das Aufstellen der Gleichungen für die Reaktionsraten, des Differentialgleichungssystems und der analytischen Bildung der partiellen Ableitungen wurde ein Programm entwickelt. Dadurch läßt sich dieses Koma-Modell leicht auf eine größere Anzahl von Muttermolekülen und Reaktionen ausdehnen, um andere Massenbereiche zu interpretieren bzw. den bisher vernachlässigten Einfluß schwererer Moleküle auf den hier untersuchten Massebereich zu berücksichtigen.

4.2.4 Behandlung der Expansion

Im Bereich zwischen 1000 km Kernabstand bis zur Kontaktfläche kann man die Geschwindigkeit in guter Näherung als konstant ($V_{exp} \approx 800$ m/s) annehmen (Lämmerzahl et al. 1987 [8]). Für die Behandlung der Expansion wurde angenommen, daß dies auch für Entfernungen < 1000 km gilt. Sehr nahe am Kern ($< 2 R_0$) ist die Abströmgeschwindigkeit zwar sicher geringer, dies führt aber im wesentlichen nur zu einer geringfügigen Verschiebung der Entfernungsskala. Bei konstanter Abströmgeschwindigkeit ist die gesamte Teilchendichte des expandierenden Gases wegen Massenerhaltung (Kontinuitätsgleichung) bestimmt durch:

$$n(r) = n(R_0) * \frac{R_0^2}{r^2} \quad (4.6)$$

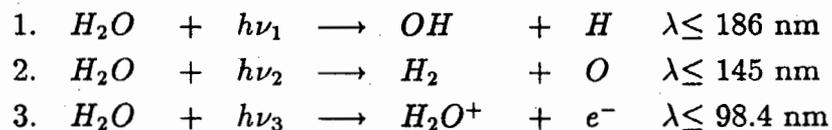
Hierbei ist R_0 der Radius des Kerns und r der radiale Abstand vom Kernmittelpunkt. Es wurde ein Radius von 5 km angenommen und radialsymmetrisches Abströmen vorausgesetzt.

Das Programm startet mit einer Mischung von sublimierten Muttermolekülen (H_2O , NH_3 , CH_4) über der Oberfläche des Kerns zum Zeitpunkt $t = 0$ und

löst das System von Differentialgleichungen für einen sehr kleinen Zeitschritt dt unter Annahme konstanter Dichte. Nach jedem Zeitschritt wird die neue radiale Position des Volumenelements und nach Gleichung (4.6) die neue Dichte für jede Spezies bestimmt. Die Größe der Zeitschritte wird durch die Lösungsroutine bestimmt. Durch Angabe einer hohen Genauigkeitsanforderung kann man jedoch erreichen, sie so klein zu halten, daß die Näherung konstanter Dichte gut erfüllt ist.

4.2.5 Behandlung der Strahlungsabsorption

Nahe dem Kometenkern (<100 km) ist die Koma für die solare UV-Strahlung optisch dick. Als überwiegender Bestandteil der kometaren Atmosphäre ist vor allem das Wasser für die Absorption verantwortlich. Die drei wichtigsten Prozesse, die zur Absorption von UV-Quanten führen, sind: (Marconi und Mendis 1983 [27])



Gemäß diesen drei Gleichungen kann man den solaren Strahlungsfluß in drei Bereiche J_1 , J_2 und J_3 unterteilen, wobei J_1 der Strahlungsfluß zwischen 145 nm und 186 nm, J_2 der Strahlungsfluß zwischen 98.4 nm und 145 nm und J_3 der Strahlungsfluß < 98.4 nm ist. Wie bei der Behandlung der Expansion nimmt man wieder sphärische Symmetrie an. Abb. 4.1 verdeutlicht die geometrischen Verhältnisse. Der Komet befindet sich im Ursprung und die x -Achse gibt die Richtung zur Sonne an. Der Winkel zwischen Giotto-Bahn und der Achse Komet-Sonne betrug 107° . Entscheidend für die Absorption ist die Säulendichte (S_{H_2O}) des Wassers entlang des Absorptionsweges.

$$S_{H_2O} = \int_{\rho=r*\sin(107^\circ)}^{\infty} n(\rho)dx + \int_{\rho=r*\sin(107^\circ)}^{\rho=r} n(\rho)dx \quad (4.7)$$

n : Dichte

ρ : radialer Abstand vom Kometen entlang des Absorptionsweges

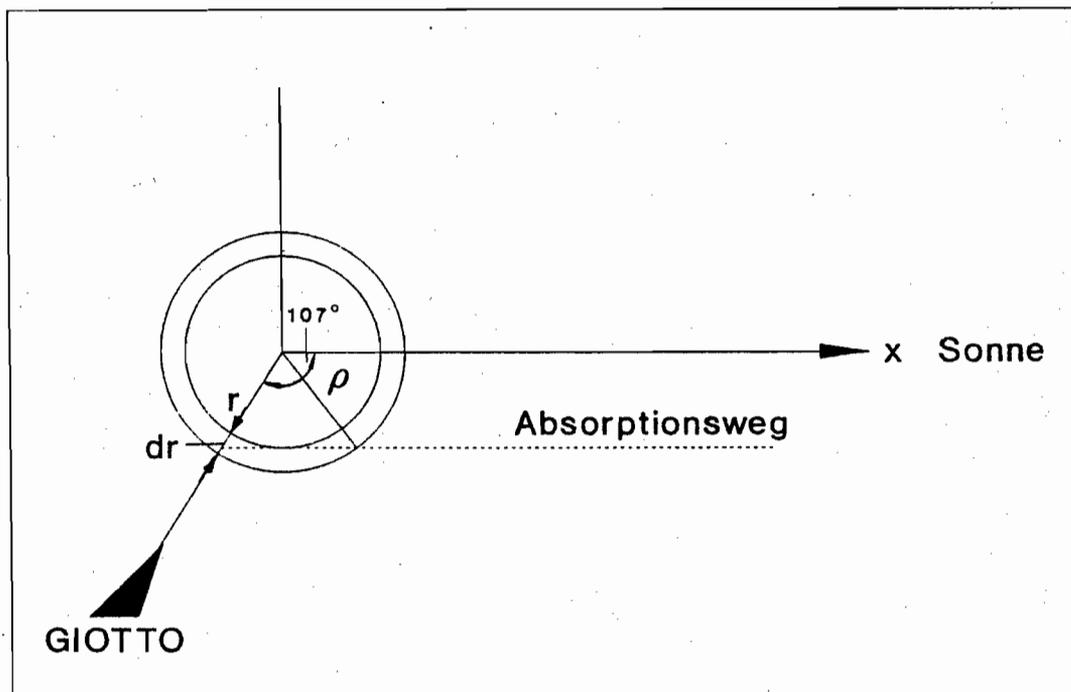


Abbildung 4.1: Der Absorptionweg entlang der GIOTTO -Bahn. Der Kometa befindet sich im Ursprung des Koordinatensystems. Der Absorptionsweg ist durch die punktierte Linie angedeutet.

Aus Abbildung 4.1 ergibt sich die Beziehung zwischen x und ρ zu:

$$x^2 = \rho^2 - r^2 \sin^2(107^\circ)$$

Damit gilt für dx :

$$dx = \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 - \sin^2(107^\circ)}} d\rho \quad (4.8)$$

Gemäß Gleichung 4.6 macht man für $n(\rho)$ den Ansatz:

$$n(\rho) = n(R_0) \frac{R_0^2}{\rho^2} \quad (4.9)$$

und erhält durch Einsetzen in Gleichung 4.7 :

$$S_{H_2O} = n(R_0) * R_0^2 \int_{\rho=r*\sin(107^\circ)}^{\infty} \frac{1}{\rho^2} dx + \int_{\rho=r*\sin(107^\circ)}^{\rho=r} \frac{1}{\rho^2} dx \quad (4.10)$$

Hierbei ist die Abnahme der H_2O -Dichte aufgrund der oben beschriebenen Prozesse vernachlässigt. Dies ist aber sicher gerechtfertigt, da die gemessene H_2O -Dichte bis etwa 10000 km keine Abweichung von der r^{-2} -Abnahme zeigt (Krankowsky et al. 1986 [6]) und die Absorption bei dieser Entfernung verschwindend gering ist.

Ersetzt man dx durch $d\rho$ (Gl. 4.8) und führt die Integrationen aus, so ergibt sich für die Säulendichte entlang des Absorptionsweges:

$$S_{H_2O} = \frac{n(R_0) R_0^2}{r \sin(107^\circ)} \left(\frac{\pi}{2} 1.19 \right) \quad (4.11)$$

Faßt man die Konstanten zusammen und benutzt wieder Gleichung 4.6 erhält man :

$$S_{H_2O} = n(r) * r * 1.95 \quad (4.12)$$

Die Absorption entlang eines Radius ergibt bis auf den Faktor 1.95 das gleiche Ergebnis. Die weiter unten beschriebenen Modellrechnungen wurden mit dieser vereinfachten Absorption berechnet. Es wurde jedoch exemplarisch eine Modellrechnung mit exakter Behandlung der Absorption durchgeführt. Dabei zeigte sich, daß sich der Faktor 1.95 nur innerhalb der ersten 100 km vom Kern, in einem etwas sanfteren Anstieg der Ionendichten, bemerkbar macht. Deshalb wurde auf eine erneute Berechnung der Modelle mit anderer Komposition der Muttermoleküle verzichtet.

Für den wellenlängenabhängigen Absorptionskoeffizienten τ_i gilt:

$$\tau_i(r) = \sum_{j=1}^3 \sigma_{ij} * S_{H_2O}(r) \quad (4.13)$$

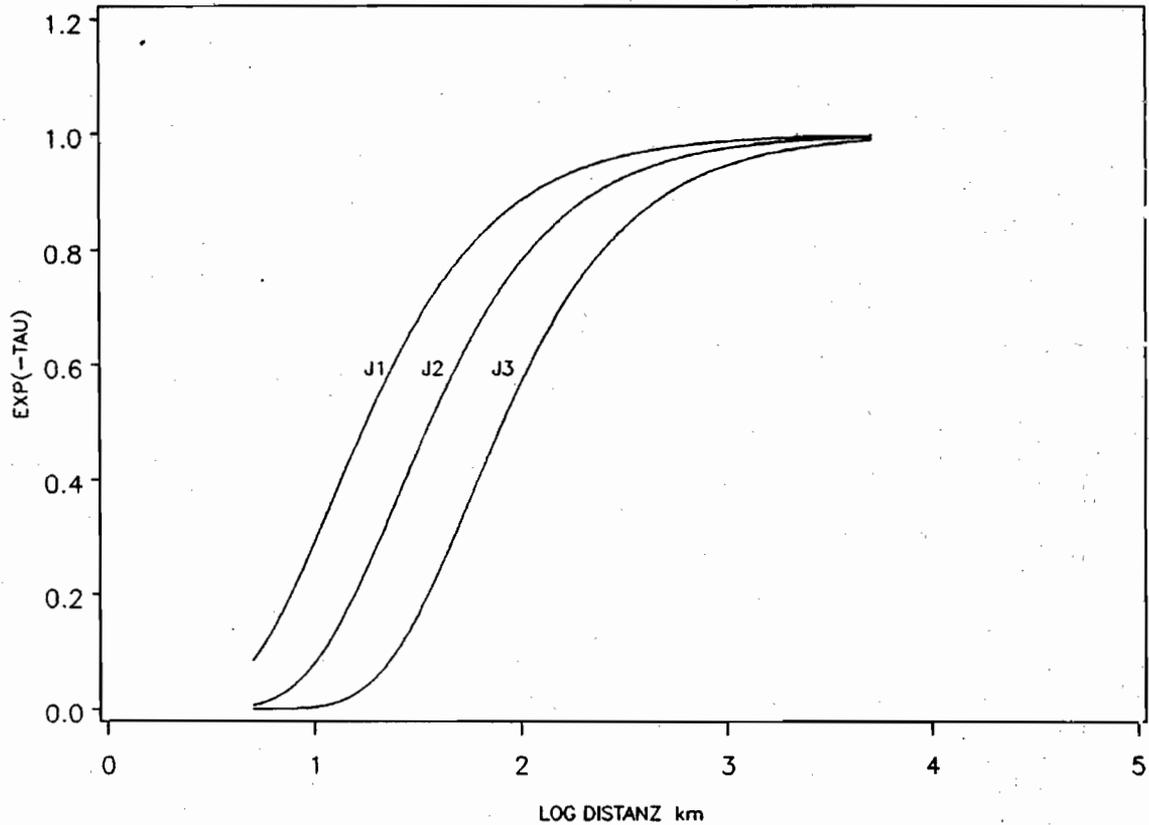


Abbildung 4.2: Die Absorption der UV-Strahlung in der Koma. Aufgetragen ist der Absorptionsfaktor $e^{-\tau}$ über dem Logarithmus des radialen Abstandes zum Kometenkern. Die drei Kurven beziehen sich auf die im Text genannten drei Wellenlängenbereiche.

Damit ergibt sich die Absorption in Abhängigkeit vom radialen Abstand r zum Kometenkern zu:

$$J_i(r) = J_i(\infty) * e^{-\tau_i(r)} \quad (4.14)$$

Hierbei sind J_i die Flüsse in den drei Wellenlängenbereichen im Kernabstand r ; S_{H_2O} ist die Säulendichte des Wassers und σ_{ij} sind die über den i -ten Strahlungsfluß gemittelten Wirkungsquerschnitte bezüglich der j -ten Reaktion. Die Wirkungsquerschnitte sind (Marconi und Mendis 1983 [27]):

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= 2.6 * 10^{-18} \text{cm}^2 & \sigma_{22} &= 2.4 * 10^{-18} \text{cm}^2 \\ \sigma_{21} &= 2.9 * 10^{-18} \text{cm}^2 & \sigma_{32} &= 1.0 * 10^{-18} \text{cm}^2 \\ \sigma_{31} &= 2.9 * 10^{-18} \text{cm}^2 & \sigma_{33} &= 8.4 * 10^{-18} \text{cm}^2 \\ \sigma_{12} &= \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0 \end{aligned}$$

Die nicht abgeschwächten Strahlungsflüsse ($J(\infty)$) im Abstand von 0.89 AE wurden aus den bei Marconi und Mendis 1983 [27] für 1 AE angegebenen berechnet.

$$J_1(\infty) = 3.5 * 10^{12} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$$

$$J_2(\infty) = 4.2 * 10^{11} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$$

$$J_3(\infty) = 4.5 * 10^{10} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$$

4.2 zeigt die Absorption für die drei Strahlungsflüsse J_1 , J_2 und J_3 in Abhängigkeit vom Abstand zum Kometenkern. Für die Ratenkoeffizienten der photochemischen Reaktionen ergibt das:

$$k_i = k_i(\infty) * e^{-\tau_i(r)} \quad (4.15)$$

Die $k_i(\infty)$ sind die Ratenkoeffizienten für den optisch dünnen Fall und sind identisch mit den im Anhang angegebenen. Während bei der Berechnung der Absorption nur die des Wassers eingeht, wird bei allen Ratenkoeffizienten der photochemischen Reaktionen die wellenlängenabhängige Absorption berücksichtigt. Im numerischen Verfahren werden zu Beginn und nach jedem Zeitschritt die Faktoren $\exp(-\tau_i(r))$ errechnet und nach Gleichung 4.15 die entsprechenden Ratenkoeffizienten für die photochemischen Prozesse bestimmt.

4.3 Ergebnisse der Rechnungen

Die Berechnungen liefern die Dichteverläufe aller Spezies (sowohl Ionen als auch Gase) bis zu einem Abstand von etwa 10^5 km vom Kometenkern. Wegen der unter 4.2 erwähnten Vereinfachungen erstreckt sich die Gültigkeit der Rechnungen nur bis etwa ≤ 4600 km Kernabstand. Der Vergleich mit Rechnungen anderer Autoren (Marconi u. Mendis 1983 [27], Giguere u. Huebner 1978 [28]) zeigt aber, daß auch darüber hinaus die Dichteverläufe qualitativ richtig beschrieben werden. Dies ist insbesondere für die neutralen Teilchen der Fall, die nur wenig mit dem Sonnenwind wechselwirken. Diese Arbeit beschränkt sich im folgenden auf die berechneten Dichteprofile der Ionen innerhalb der Kontaktfläche.

Die Abbildungen 4.3 bis 4.5 zeigen in drei Gruppen (H_2O , NH_3 , CH_4) unterteilt die berechneten Dichteprofile für Ionen. Das Mischungsverhältnis der drei Muttermoleküle betrug bei dieser Rechnung $[H_2O] : [NH_3] : [CH_4] = 100 : 2 : 3$. Aufgetragen ist jeweils die Teilchenzahldichte über der Entfernung zum Kometenkern.

In Abb. 4.3 ist der Dichteverlauf der Ionen der Wassergruppe und der Elektronen (= Gesamtionen) aufgetragen. Innerhalb der Kontaktfläche ist das hydratisierte Wasserion (H_3O^+) das dominierende Ion der Wassergruppe. Dies liegt an der Reaktion:



Diese Reaktion ist aufgrund der großen Häufigkeit des Muttermoleküls Wasser die wichtigste Reaktion, verliert jedoch wegen der Dichteabnahme durch Expansion mit zunehmender Entfernung vom Kern an Bedeutung. Die anderen Ionen der Wassergruppe erreichen fast eine Gleichgewichtsdichte, weil sich hier Expansion und zunehmender Strahlungsfluß nahezu ausgleichen.

Abb. 4.4 zeigt den Dichteverlauf der Ionen der Ammoniakgruppe. Bis einige 10^3 km Entfernung ist das Ammoniumion das häufigste Ion dieser Gruppe. Es entsteht in der Reaktion:



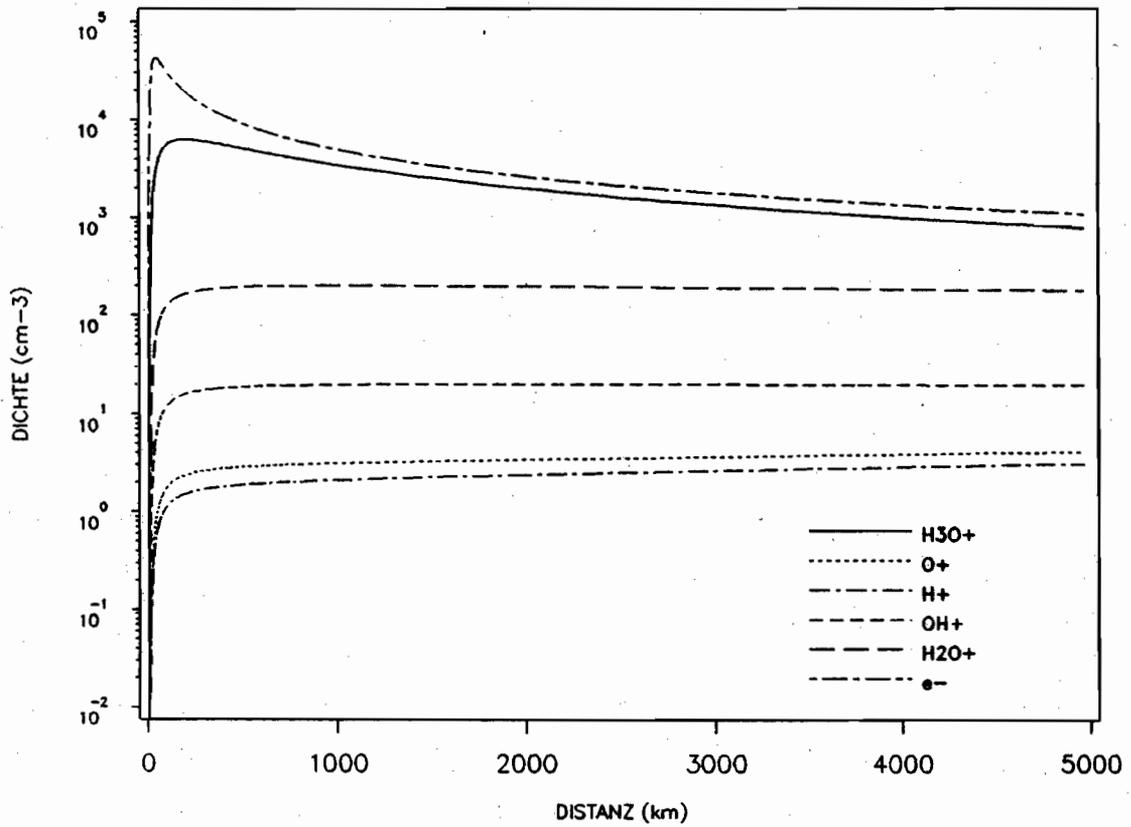


Abbildung 4.3: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der H_2O -Gruppe und der Elektronen (=Gesamtionen). Aufgetragen ist die Dichte über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $\text{H}_2\text{O} : \text{NH}_3 : \text{CH}_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

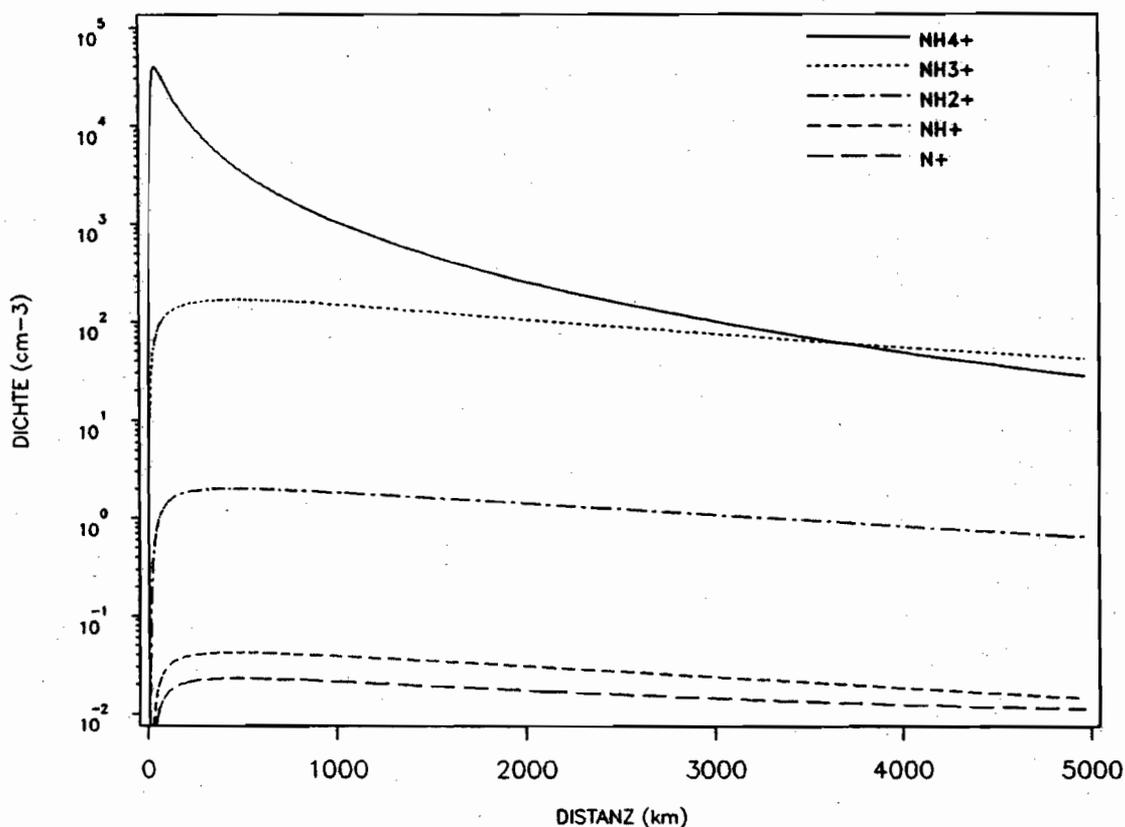


Abbildung 4.4: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der NH_3 -Gruppe. Aufgetragen ist die Dichte über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

Diese führt durch die hohen Dichten von H_3O^+ und des Muttermoleküls Ammoniak zu großen Umsätzen. In zunehmender Entfernung vom Kern macht sich die kurze Skalenlänge für Photozerstörung des Ammoniaks bemerkbar. Zweithäufigstes Ion ist das NH_3^+ , daß vor allem durch Ladungsaustausch mit Ionen der anderen Muttermoleküle gebildet wird. Quelle für die Produktion von NH_2^+ ist die dissoziative Ionisation des Muttermoleküls, während NH^+ und N^+ kaum nennenswerte Dichten erreichen.

Abb. 4.5 gibt die Dichteprofile der Ionen der Methangruppe wieder. Häufigstes Ion dieser Gruppe ist das CH_3^+ , das hauptsächlich durch dissoziative Ionisation des Methans erzeugt wird. Zweithäufigstes Ion ist bis etwa 1500 km das CH_2^+ , in größerem Abstand vom Kern dann das Ion des Muttermoleküls. Der ständige Anstieg der C^+ -Konzentration ist eine Folge des eingeschränkten Modells. Wichtige Reaktionen, die zum Abbau des Kohlenstoffions führen, wurden im Modell nicht berücksichtigt, da sie zur Bildung von Molekülen beitragen, die außerhalb

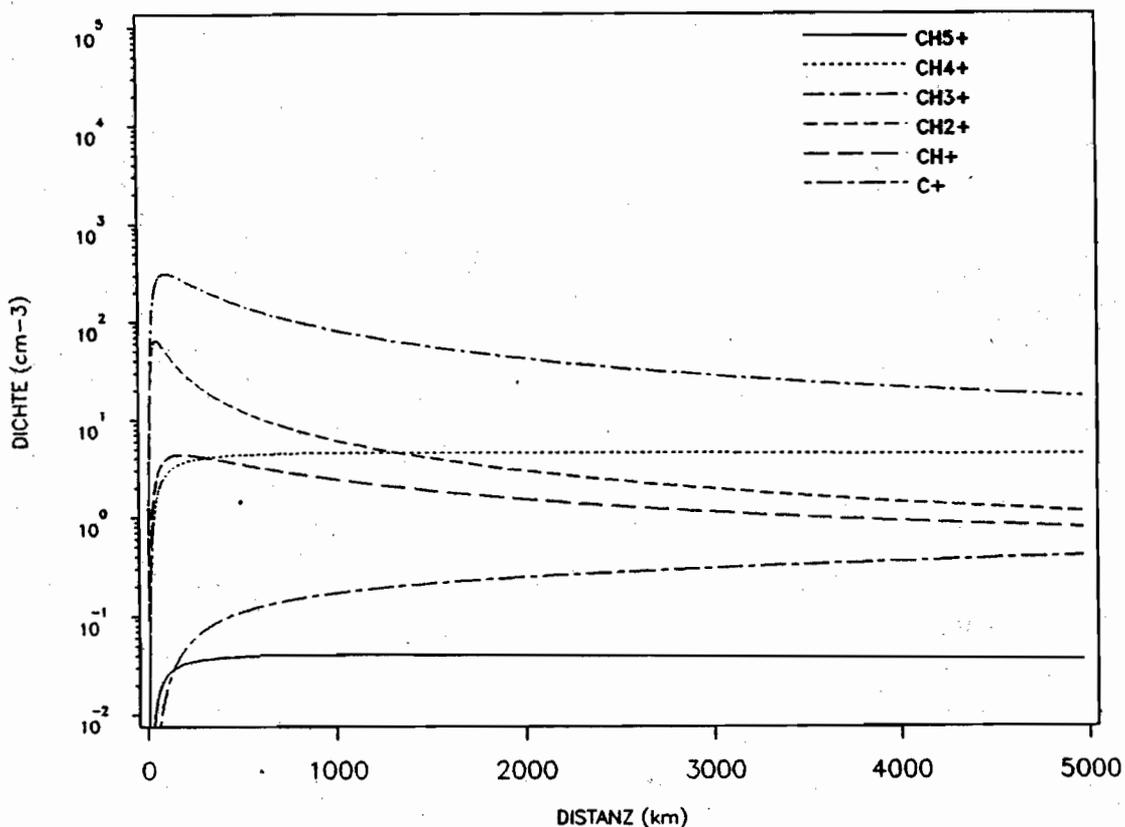


Abbildung 4.5: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der CH_4 -Gruppe. Aufgetragen ist die Dichte über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

des zu interpretierenden Massebereichs liegen. Eine wichtige Abbaureaktion wäre z.B. die Reaktion mit dem Muttermolekül Wasser:



Die Abbildungen 4.6 bis 4.9 zeigen die berechneten Zusammensetzungen der Massen 15 - 19 AME innerhalb der Kontaktfläche für die gleiche Komposition der Muttermoleküle. Abb. 4.6 zeigt, daß das Methyl-Kation CH_3^+ der überwiegende Bestandteil der Masse 15 AME ist. Dies liegt, wie bereits erwähnt, daran, daß es nicht mit Wasser reagiert. Abbildung 4.7 zeigt die Zusammensetzung der Masse 16 AME zu der Tochterprodukte aller drei berücksichtigten Muttermoleküle beitragen. Hauptbestandteile sind zu etwa gleichen Anteilen CH_4^+ und O^+ . NH_2^+ macht etwa 10% aus, nimmt aber mit zunehmender Entfernung ab. Die Masse 17 AME (Abb. 4.8) setzt sich überwiegend aus NH_3^+ zusammen, der

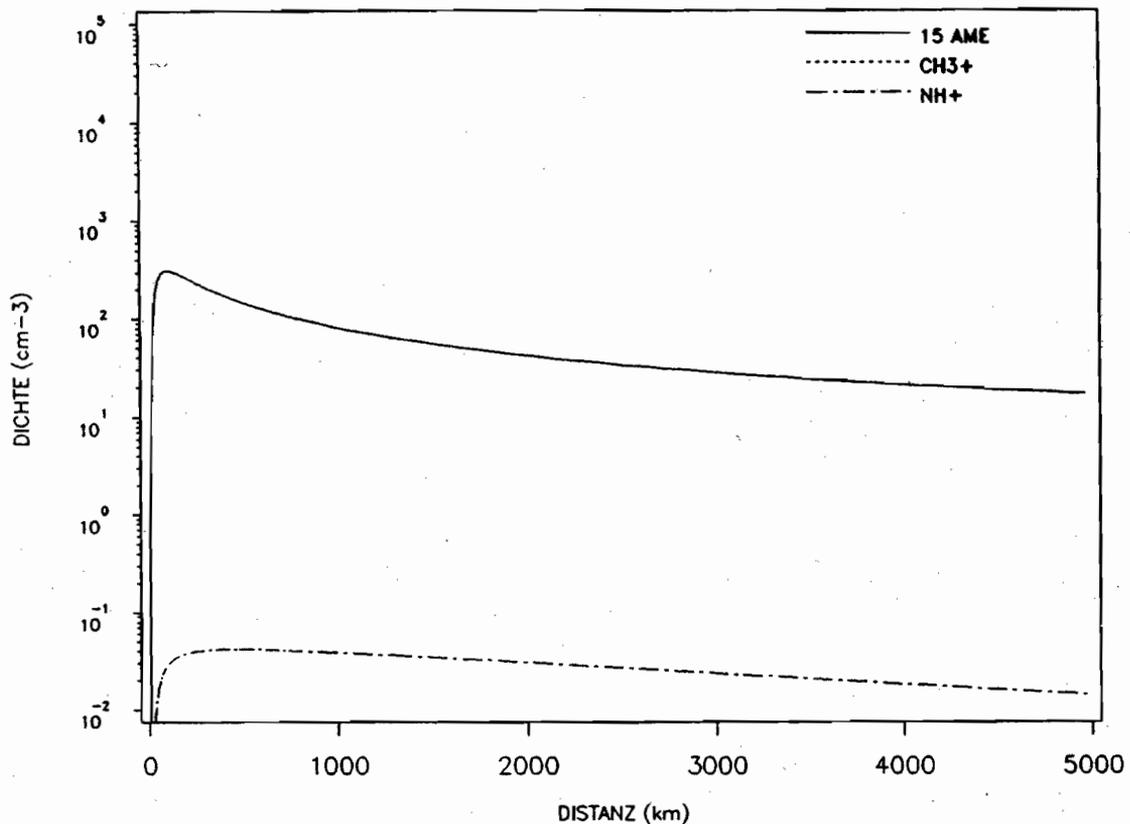


Abbildung 4.6: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der Masse 15 AME. Aufgetragen ist die Summe der Dichten (durchgezogene Linie) und die Dichten der einzelnen Komponenten (unterbrochene Linien) über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Die Kurven von CH_3^+ und der Masse 15 AME überlagern sich. Mischungsverhältnis: $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2:3$.

Beitrag von OH^+ nimmt allerdings mit zunehmender Entfernung zu. In Abb. 4.9 ist die Zusammensetzung der Masse 18 AME dargestellt. Nahe am Kometen ist NH_4^+ Hauptbestandteil der Masse 18 AME, nimmt aber mit zunehmender Entfernung ab. Bei etwa 2000 km Entfernung vom Kometen erreichen H_2O^+ und NH_4^+ gleiche Partialdichten. Grund für die Abnahme des NH_4^+ ist hauptsächlich die dissoziative Rekombination.

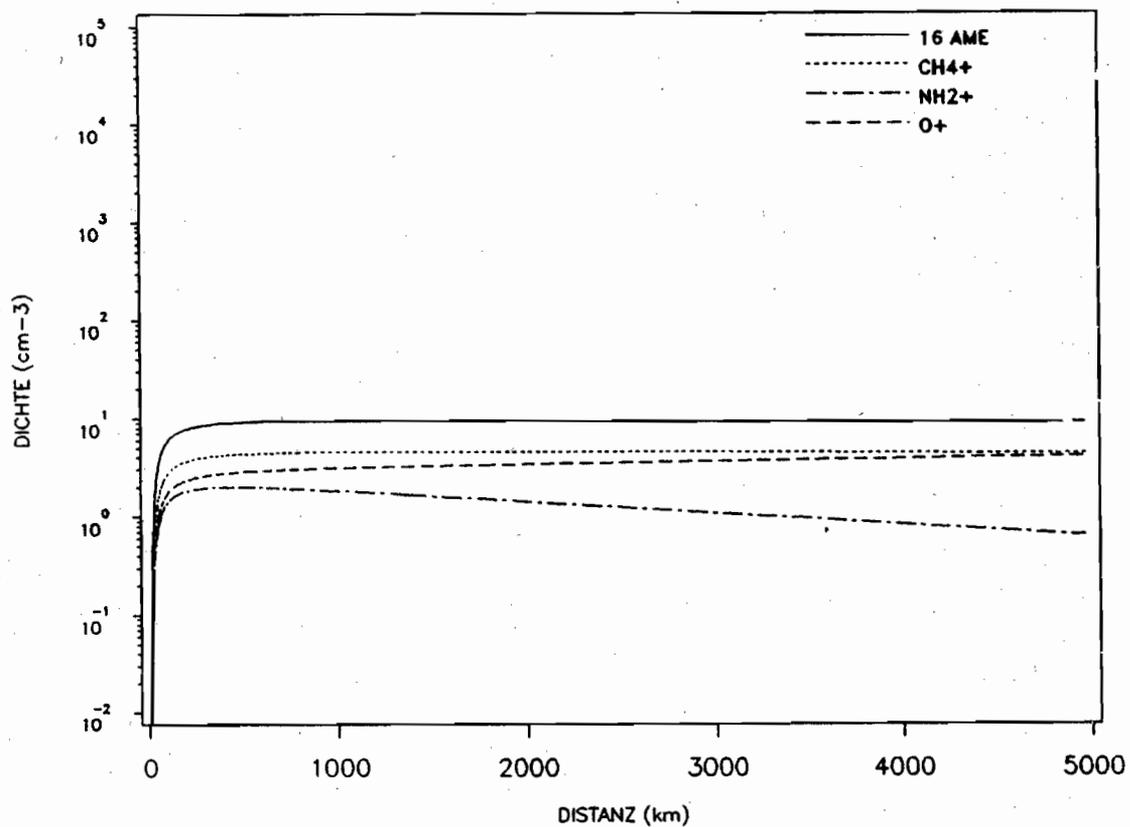


Abbildung 4.7: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der Masse 16 AME. Aufgetragen ist die Summe der Dichten (durchgezogene Linie) und die Dichten der einzelnen Komponenten (unterbrochene Linien) über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

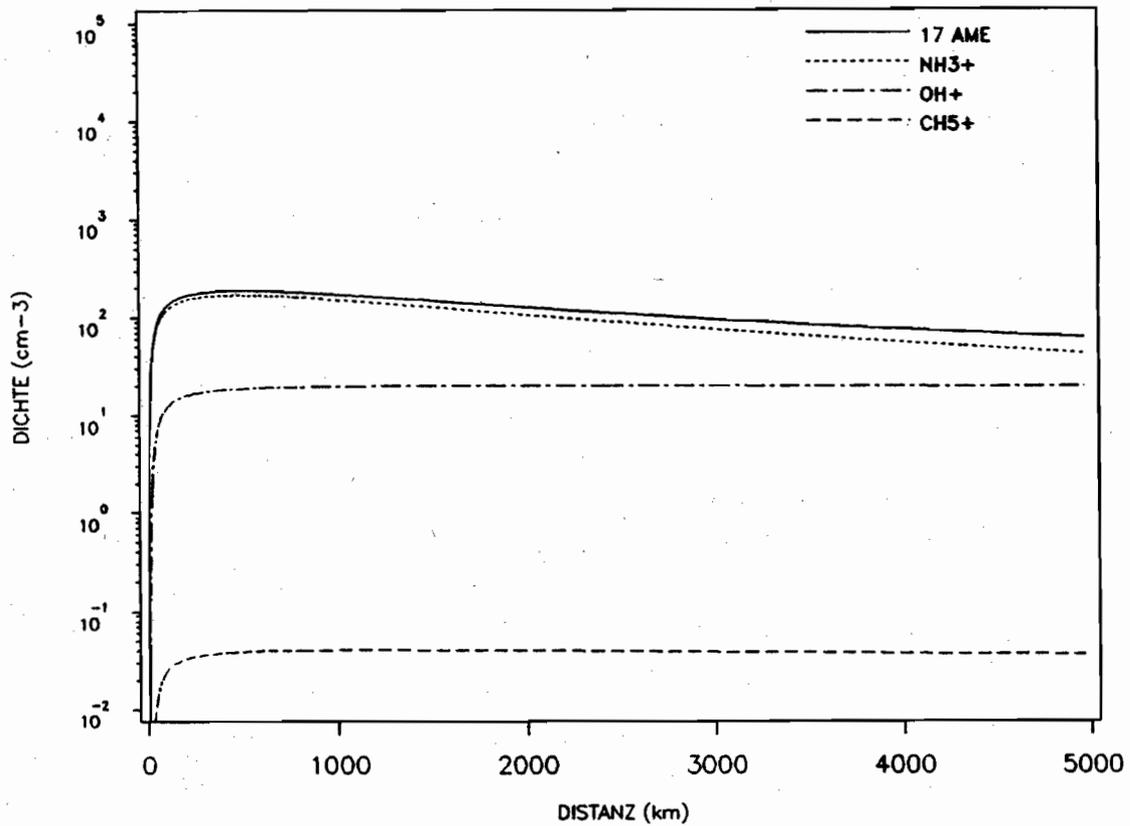


Abbildung 4.8: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der Masse 17 AMU. Aufgetragen ist die Summe der Dichten (durchgezogene Linie) und die Dichten der einzelnen Komponenten (unterbrochene Linien) über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $\text{H}_2\text{O} : \text{NH}_3 : \text{CH}_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

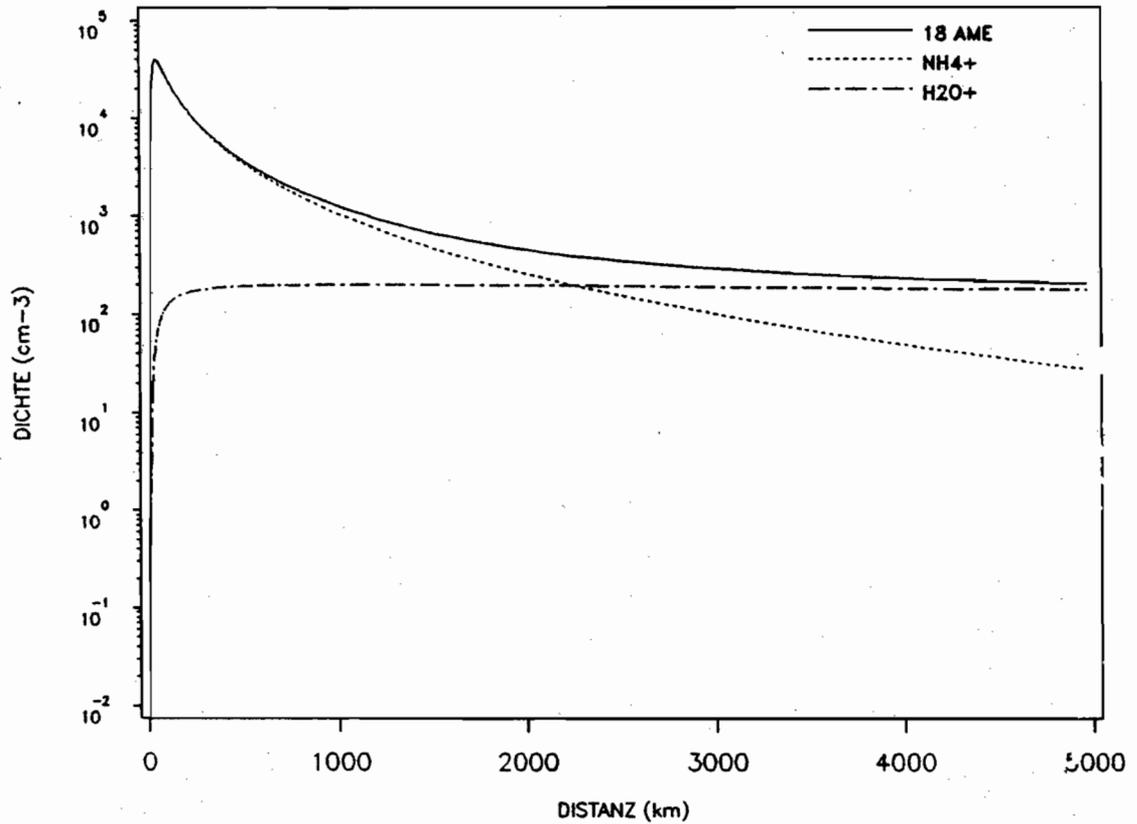


Abbildung 4.9: Berechneter Dichteverlauf der Ionen der Masse 18 AME. Aufgetragen ist die Summe der Dichten (durchgezogene Linie) und die Dichten der einzelnen Komponenten (unterbrochene Linien) über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Mischungsverhältnis: $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2:3$. Nähere Erläuterungen im Text.

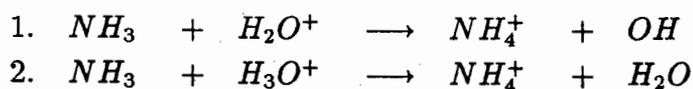
4.4 Vergleich mit den Messungen

Die vom NMS-Energieanalysator gewonnenen Ionenspektren innerhalb der Kontaktfläche überdecken einen Entfernungsbereich von 1000 km bis 4000 km. Das Spektrum bei 1000 km zeigt, wie bereits in Kapitel 3 erwähnt, Abweichungen vom generellen Trend und kann nur bedingt zum Vergleich herangezogen werden. Die Modellrechnungen wurden mit den in Tabelle 4.4 aufgeführten unterschiedlichen Kompositionen der drei Muttermoleküle Wasser, Ammoniak und Methan durchgerechnet.

Modell	Mischungsverhältnis		
	[H ₂ O]	[NH ₃]	[CH ₄]
1.	100	0.0	0.0
2.	100	0.5	0.0
3.	100	1.0	0.0
4.	100	2.0	0.0
5.	100	0.0	2.0
6.	100	0.5	2.0
7.	100	1.0	2.0
8.	100	1.5	1.0
9.	100	1.5	2.0
10.	100	1.5	3.0
11.	100	1.0	5.0
12.	100	2.0	3.0
13.	100	3.5	5.0

Tabelle 4.4: Die verschiedenen Muttermolekülverhältnisse der Modellrechnungen.

Zur Bestimmung der NH₃-Konzentration eignet sich besonders das Verhältnis der Massen 19 zu 18 AME. Die wichtigsten Reaktionen des Ammoniaks, die die Massen 19 und 18 AME betreffen sind:



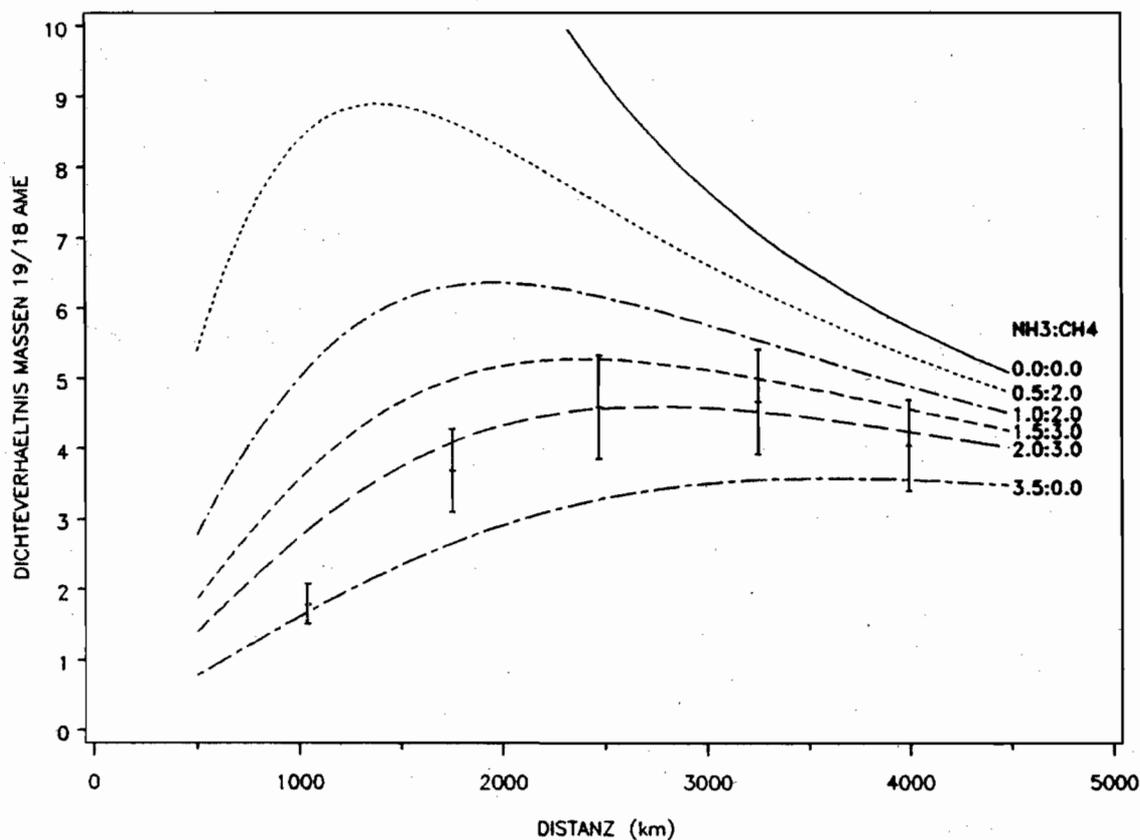


Abbildung 4.10: Dichteverhältnis der Ionen der Massen 19 und 18 AME. Aufgetragen ist das Dichteverhältnis über dem radialen Abstand zum Kometen. Die Kurven zeigen die berechneten Verhältnisse für verschiedene Muttermolekülzusammensetzung. Die an den Kurven angegebenen Verhältnisse von NH_3 zu CH_4 sind auf die H_2O -Dichte (=100) bezogen. Zum Vergleich sind die gemessenen Dichteverhältnisse eingezeichnet. Nähere Erläuterungen im Text.

Während die erste Reaktion nur die Zusammensetzung der Masse 18 AME ändert, führt die zweite Reaktion zum Abbau der Masse 19 AME zugunsten der Masse 18 AME. Abb. 4.10 zeigt die berechneten 19/18 AME Massen-Verhältnisse für verschiedene Mischungen der Muttermoleküle Wasser, Ammoniak und Methan im Vergleich mit den gemessenen Verhältnissen. Aufgetragen ist das 19/18 AME-Verhältnis über der Entfernung zum Kometen. Da Tochterprodukte des Methans zu keiner der beiden Massen beitragen, ist das Massen-Verhältnis 19/18 AME unempfindlich gegen eine Variation der Methan-Konzentration. Die Fehlerbalken entsprechen einem Fehler von 16 %, der damit geringer als in Kap. 3.5 angegeben ist, weil in das Verhältnis der Fehler der absoluten Detektorverstärkung nicht eingeht. Der Vergleich der Meßpunkte mit den berechneten Dichteprofilen ergibt, daß 1.5% NH_3 zu gering und 3.5% NH_3 -Anteil deutlich zuviel ist, um

mit den gemessenen Verhältnissen in Einklang gebracht zu werden. Gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung ergibt ein Mischungsverhältnis von $H_2O : NH_3 = 100:2$, wobei der Datenpunkt bei 1000 km starke Abweichung zeigt. Interpoliert man zwischen den Kurven für 2% und 3.5% NH_3 , so würde 2.5% NH_3 ebenfalls gut übereinstimmen.

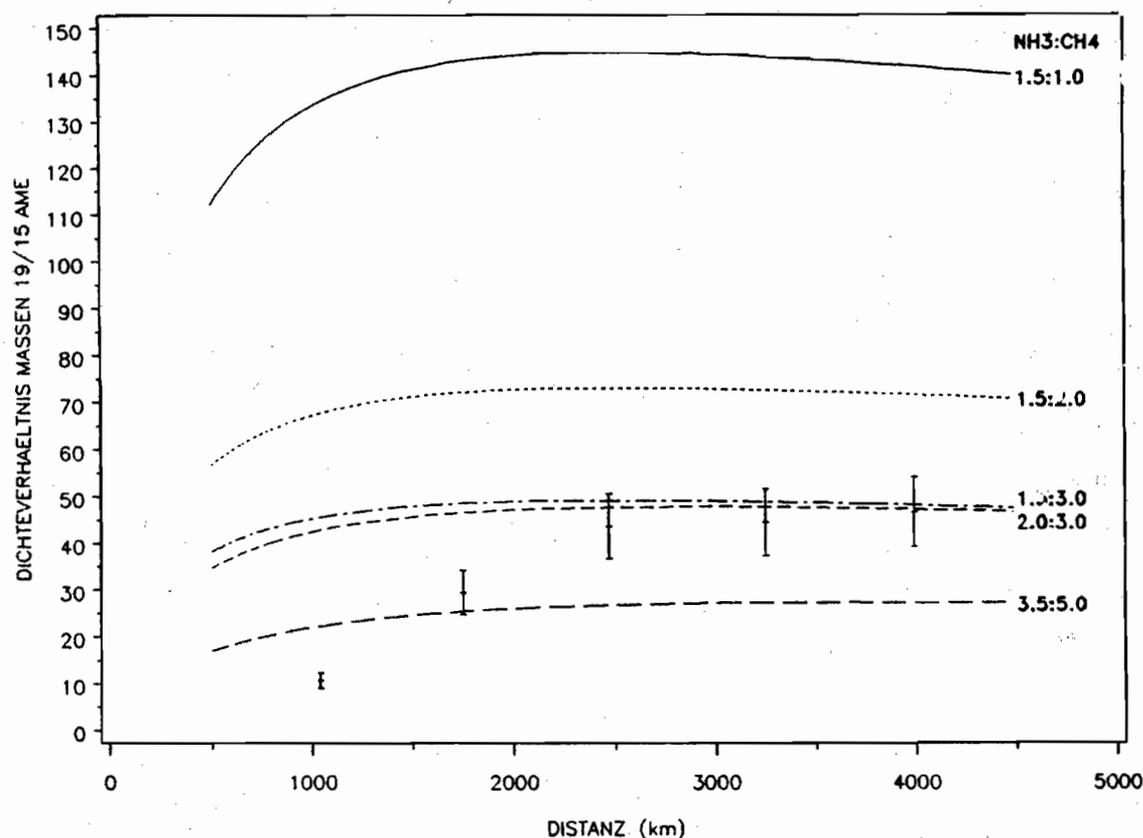


Abbildung 4.11: Dichteverhältnis der Ionen der Massen 19 und 15 AME. Aufgetragen ist das Dichteverhältnis über dem radialen Abstand zum Kometen. Die Kurven zeigen die berechneten Verhältnisse für verschiedene Muttermolekülzusammensetzungen. Die an den Kurven angegebenen Verhältnisse von NH_3 zu CH_4 sind auf die H_2O -Dichte (=100) bezogen. Zum Vergleich sind die gemessenen Dichteverhältnisse eingezeichnet. Nähere Erläuterungen im Text.

Der Methan-Anteil der Kometenatmosphäre läßt sich an der Masse 15 AME ablesen. In Abb. 4.11 sind die berechneten Verhältnisse der Massen 19/15 AME für unterschiedliche CH_4 -Konzentrationen aufgetragen. Wie man sieht, läßt sich das Verhältnis dieser beiden Massen ohne CH_4 -Anteil nicht erklären. An den beiden Kurven für die Mischungsverhältnisse $NH_3 : CH_4 = 1.5:3$ und $NH_3 : CH_4 = 2:3$ kann man den Einfluß der NH_3 -Konzentration erkennen, der allerdings nicht

sehr ausgeprägt ist. Betrachtet man die drei Meßpunkte bei größerer Entfernung zum Kometen, so wären 2% CH_4 -Anteil sicher zu gering. Interpoliert man wieder zwischen den Kurven und beachtet, daß man nicht linear interpolieren darf, sind 4% CH_4 deutlich zu hoch und auch 3.5% ergeben keine bessere Übereinstimmung als 3% CH_4 -Anteil. Bei dieser Abbildung zeigt auch der Meßpunkt bei etwa 1750 km Abstand eine große Abweichung, die durch die niedrige gemessene Partialdichte der Masse 19 AME zustande kommt. Bei diesem Spektrum sind die gemessenen Partialdichten für die beiden häufigsten Massen 19 und 18 AME geringer als bei dem davor aufgenommenen Spektrum. Dies könnte darauf hindeuten, daß die Einschränkungen hinsichtlich der Auswertemethode, die das Spektrum bei 1000 km betreffen (siehe Kap. 3.4.3), sich hier schon bemerkbar machen.

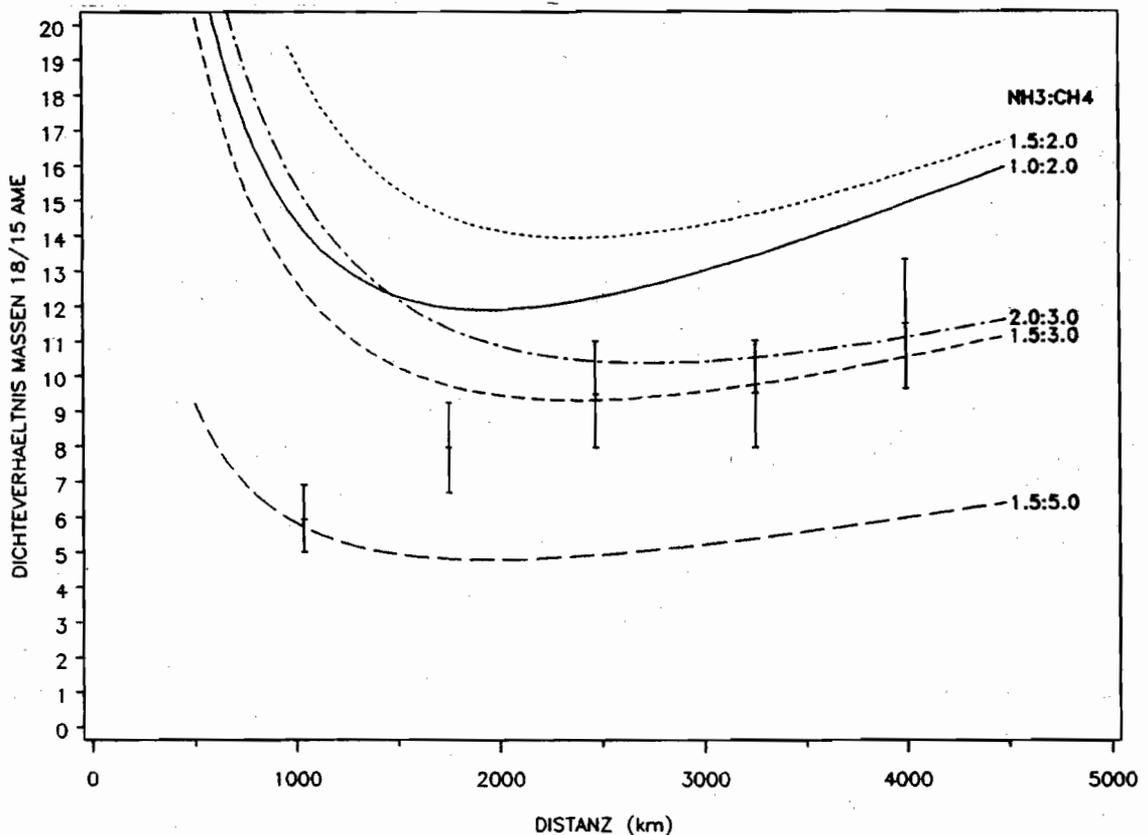


Abbildung 4.12: Dichteverhältnis der Ionen der Massen 18 und 15 AME. Aufgetragen ist das Dichteverhältnis über dem radialen Abstand zum Kometen. Die Kurven zeigen die berechneten Verhältnisse für verschiedene Muttermolekülzusammensetzungen. Die an den Kurven angegebenen Verhältnisse von NH_3 zu CH_4 sind auf die H_2O -Dichte (=100) bezogen. Zum Vergleich sind die gemessenen Dichteverhältnisse eingezeichnet. Nähere Erläuterungen im Text.

Eine weitere Überprüfung der Konzentrationen der drei Muttermoleküle läßt sich anhand des Verhältnisses der Massen 18/15 AME durchführen. In Abbildung 4.12 sind wieder die berechneten und die gemessenen Verhältnisse über der Entfernung zum Kometen aufgetragen. Wiederum zeigen die beiden Meßpunkte bei 1000 km und 1750 km Entfernung eine relativ große Abweichung. Sieht man davon ab, so ergibt sich ebenfalls gute Übereinstimmung für das Mischungsverhältnis $NH_3 : CH_4 = 2:3$.

Faßt man die Ergebnisse der drei Vergleiche zusammen, so kann man aufgrund der Rechnungen und der gemessenen Ionendichten auf ein Mischungsverhältnis der drei Muttermoleküle von $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2.0-2.5:3$ schließen.

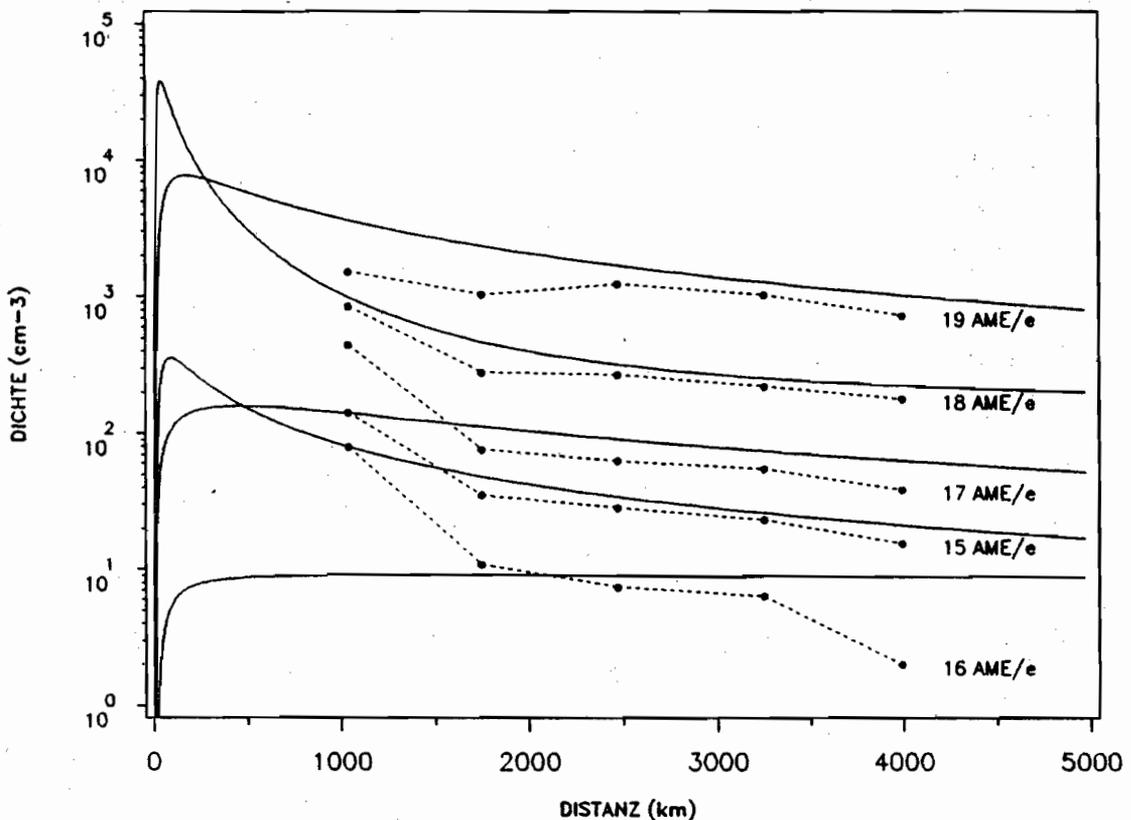


Abbildung 4.13: Vergleich zwischen den berechneten Dichteprofilen und den gemessenen Partialdichten der Ionenmassen 15 AME bis 19 AME. Aufgetragen ist die Dichte über dem radialen Abstand zum Kometenkern. Die Messpunkte sind zum besseren Vergleich durch punktierte Linien verbunden.

Abb. 4.13 zeigt die Ergebnisse einer Modellrechnung mit dem Mischungsverhältnis $H_2O : NH_3 : CH_4$ von 100:2:3 im Vergleich mit den gemessenen Daten. Die Übereinstimmung der absoluten Dichten ist nicht sehr gut, da generell die Dich-

ten der Modellrechnungen etwas zu hoch sind. Die erhöhten Dichten der Massen 19 AME, 18 AME und 17 AME sind eine Folge der eingeschränkten Zahl der Muttermoleküle. Jede weitere berücksichtigte Spezies wird diese Dichten reduzieren. Am bedeutensten wäre hier wohl eine Einbeziehung des Muttermoleküls CO_2 , dessen Tochterprodukte CO_2^+ und CO^+ mit Wasser und dessen Tochterprodukten reagieren. Die Erweiterung des Modells um nur dieses eine Muttermolekül wird allerdings sowohl die Anzahl der Reaktionen, als auch die Zahl der zu berücksichtigenden Spezies drastisch erhöhen, ohne wesentlichen Einfluß auf die Ergebnisse bezüglich der Ammoniak- und Methankonzentrationen zu nehmen.

4.5 Fehlerbetrachtung

In die oben beschriebenen Rechnungen gehen zahlreiche fehlerbehaftete Parameter ein. So weisen die Ratenkoeffizienten der Ionen-Molekül-Reaktionen Fehlergrenzen zwischen $\pm 10\%$ und $\pm 30\%$ auf. Für einige Ratenkoeffizienten existieren nur Abschätzungen, so daß sich Fehlergrenzen schwer angeben lassen. Der Fehler der sich aus der Unkenntnis der Elektronentemperatur $T_e(r)$ ergibt, geht im wesentlichen nur in die absoluten Dichten ein, der Einfluß auf die Dichteverhältnisse ist gering, da sich die Rekombinationsraten für beide Ionen in der gleichen Weise ändern, sofern die gleiche T_e -Abhängigkeit besteht. Der Fluß der solaren UV-Strahlung wurde der Literatur entnommen. Im EUV-Bereich sind jedoch Schwankungen möglich, so daß der Fluß zum Zeitpunkt der GIOTTO -Mission nicht mit diesem Wert übereinstimmen muß. Die Absorptions-Wirkungsschnitte für Radikale sind teilweise unbekannt. Aufgrund dieser Unsicherheiten ist eine exakte Fehleranalyse nicht durchführbar. Berechnet man die Fehler, die sich aufgrund der Ratenkoeffizienten ergeben, können die Fehler der errechneten absoluten Dichten, je nach Spezies, bis zu 100% betragen. Betrachtet man jedoch wieder Massenverhältnisse und berücksichtigt nur die wichtigen Reaktionen, so ergeben sich geringere Fehler, weil die Fehler der Reaktionen die ein Massen-Verhältnis nicht beeinflussen nicht eingehen. So ergibt sich für CH_4 eine obere Grenze von 4% und eine untere Grenze von 1.5% und für NH_3 eine obere Grenze von 4% und eine untere Grenze von 1.0% relativ zur H_2O - Konzentration.

4.6 Vergleich mit den Ergebnissen anderer Autoren

Allen et al. 1987 [30] veröffentlichten eine Arbeit, die sich ebenfalls mit der Bestimmung des Ammoniak- und Methan-Anteils beschäftigt. Sie vergleichen ihre Modellrechnungen mit den Messungen des Ionen-Massenspektrometer- Experiments IMS der Giotto Sonde (Balsiger et al. 1986 [31]). Ihre Mischungsverhältnisse von $H_2O : NH_3 = 100:1.0$ bis 2.0 und $H_2O : CH_4 = 100:2$ sind etwas geringer als die oben abgeleiteten. Allen et al. 1987 [30] benutzen zwar ein eingeschränkteres Modell (70 gegenüber 149 Reaktionen), gehen aber im wesentlichen von den gleichen Annahmen aus, so daß dies die unterschiedlichen Ergebnisse nicht erklären kann. Abbildung 4.14 zeigt die berechneten 19/18 AME Verhältnisse aus Abb. 4.10. Neben den NMS-Daten sind hier auch die IMS-Daten aufgetragen. Man sieht, daß, bis auf die Meßpunkte bei etwa 3600 km und 4700 km, die Daten innerhalb ihrer Fehlergrenzen kompatibel sind. Die Diskrepanz in den NH_3 - und CH_4 -Konzentrationen muß also auf Unterschiede in den Modellrechnungen zurückzuführen sein. Die Ratenkoeffizienten für die dissoziative Rekombination die Allen et al. verwenden, weichen erheblich von den in dieser Arbeit verwendeten ab. Dies betrifft die Reaktionen:

1. $H_3O^+ + e^- \rightarrow$ Produkte
2. $H_2O^+ + e^- \rightarrow$ Produkte
3. $NH_4^+ + e^- \rightarrow$ Produkte

Reakt.	Allen et al.	Ref.	Allen et al.	diese Arbeit	Ref.	andere	Ref
1.	$3.39 \cdot 10^{-4}$		$2.00 \cdot 10^{-6}$ [34]	$6.82 \cdot 10^{-7}$	[27]	$6.96 \cdot 10^{-7}$	[33]
2.	$1.30 \cdot 10^{-5}$		$7.59 \cdot 10^{-7}$ [33]	$6.99 \cdot 10^{-7}$	[27]	$5.00 \cdot 10^{-7}$	[28]
3.	$4.10 \cdot 10^{-5}$		$1.35 \cdot 10^{-6}$ [35]	$1.30 \cdot 10^{-6}$	[25]	—	

Tabelle 4.5: Vergleich der Ratenkoeffizienten für $T_e=300$ K.

In Tab. 4.5 sind die von Allen et al. 1987 [30] verwendeten Ratenkoeffizienten, mit den in dieser Arbeit und den Arbeiten anderer Autoren benutzten, einander gegenübergestellt. Es fällt auf, daß Allen et al. durchweg höhere Ratenkoeffizienten benutzen. Besonders signifikant ist der Unterschied des Ratenkoeffizienten

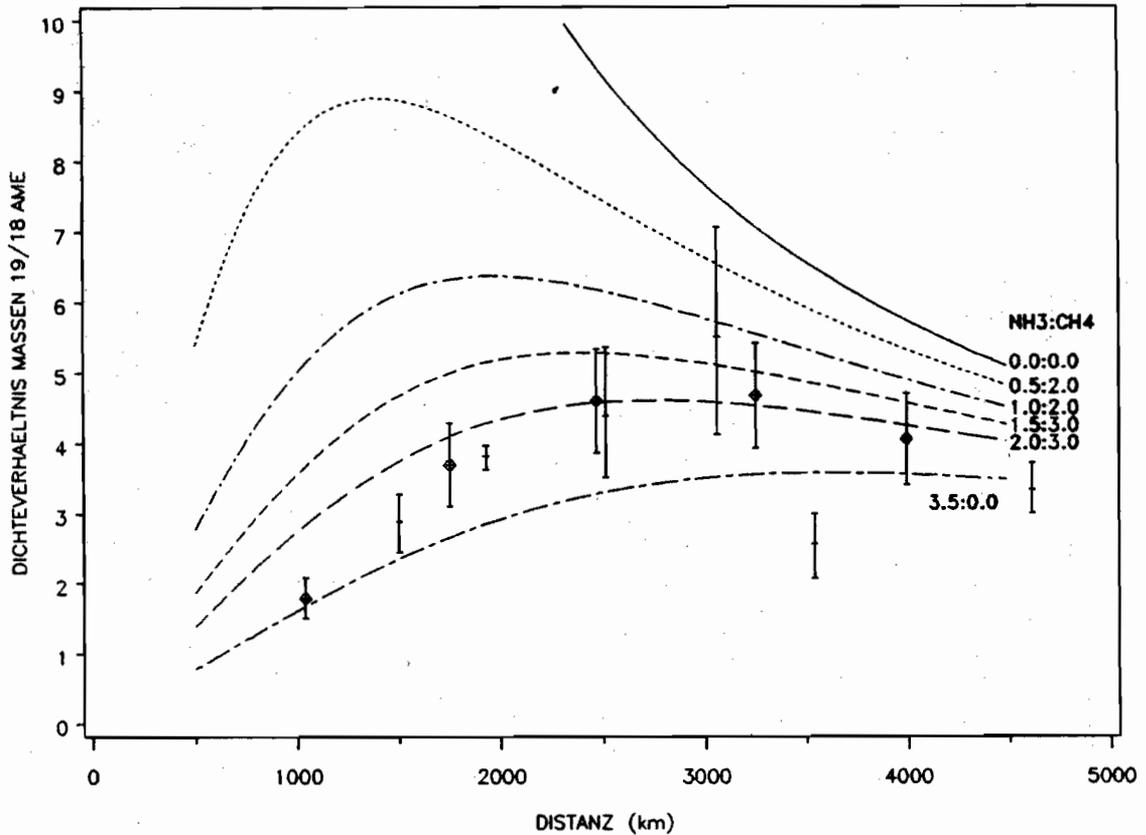


Abbildung 4.14: Dichteverhältnis der Ionen der Massen 19 und 18 AME. Aufgetragen ist das Dichteverhältnis über dem radialen Abstand zum Kometen. Die Kurven zeigen die berechneten Verhältnisse für verschiedene Muttermolekülsammensetzungen. Die an den Kurven angegebenen Verhältnisse von NH_3 zu CH_4 sind auf die H_2O -Dichte (=100) bezogen. Zum Vergleich sind die gemessenen Dichteverhältnisse des NMS-Experiments (Rauten mit Fehlerbalken) und Ionenmassenspektrometers IMS eingezeichnet. Nähere Erläuterungen im Text.

für die dissoziative Rekombination des H_3O^+ . Durch den um drei Größenordnungen höheren Ratenkoeffizienten für diese Reaktion verringert sich die Partikeldichte der Masse 19 AME und damit auch das Verhältnis 19/15 AME. Diese Autoren benötigen daher eine geringere CH_4 -Konzentration, um ihr Modell dem gemessenen Verhältnis der Massen 19/15 AME anzupassen. Die Unterschiede der Ratenkoeffizienten der 2. und 3. Reaktion sind nicht ganz so groß, so daß das 19/18 AME-Verhältnis und damit die NH_3 -Konzentration etwas weniger beeinflusst wird. In den von Allen et al. 1987 [30] angegebenen Referenzen findet man jedoch Ratenkoeffizienten die innerhalb der Fehlergrenzen mit den in dieser Arbeit verwendeten übereinstimmen. In Tabelle 4.5 sind die Ratenkoeffizienten wie man sie in den von Allen et al. 1987 [30] angegebenen Referenzen findet

aufgeführt.

Eine weitere Modellrechnung zum NH_3 -Gehalt wurde von Marconi und Mendis 1988 [32] veröffentlicht. Auch sie vergleichen ihre Rechnungen mit den IMS-Daten. Sie finden ebenfalls eine etwas geringere NH_3 -Konzentration von 1–2% unter der Annahme, daß die solare Strahlung dem Literaturwert für das solare Minimum entspricht. Die von Marconi und Mendis 1988 [32] verwendeten Ratenkoeffizienten, sind mit den in dieser Arbeit verwendeten kompatibel. Sie haben jedoch in ihrem Modell eine zusätzliche Reaktion, die zum Abbau von H_3O^+ führt.



Der Ratenkoeffizient ist relativ klein aber möglicherweise noch zu hoch abgeschätzt (siehe Referenz bei Marconi und Mendis 1988 [32]). Diese zusätzliche Reaktion reduziert das 19/18 AME-Verhältnis um 10–20% und führt so zu einer etwas geringeren NH_3 -Konzentration. Ein weiterer wesentlicher Unterschied zwischen ihrem Modell und dem oben beschriebenen besteht in der verwendeten Elektronentemperatur. Die von Marconi und Mendis 1988 [32] berechnete theoretische Elektronentemperatur variiert stark mit der Distanz zum Kern. Ihre T_e beträgt 200 K bei 10 km Kernabstand, fällt auf ein Minimum von 20 K bei 250 km und steigt dannach bis auf 800 K bei 5000 km. Insbesondere die geringe $T_e \leq 100$ K unter 2000 km erhöht die Raten für die dissoziative Rekombination (siehe Gl.4.3). Marconi und Mendis 1988 [32] verwenden auch eine unterschiedliche T_e -Abhängigkeit für die dissoziative Rekombination von H_3O^+ (T_e^{-1} für $T_e > 200$ K, $T_e^{-0.5}$ für $T_e < 200$ K). Dies verkleinert das 19/18 AME-Dichteverhältnis für Elektronentemperaturen unter 200 K d.h. im Entfernungsbereich < 2000 km gemäß ihrem T_e -Profil. Die T_e -Abhängigkeit die Marconi und Mendis 1988 [32] verwenden, ist der Arbeit von Heppner et al. 1976 [34] entnommen. In den jüngeren Arbeiten von McGowan et al. 1979 [33] und Mul et al. 1983 [44] wurde diese, von der Theorie abweichende, T_e -Abhängigkeit nicht beobachtet. Diese Autoren finden keine Abweichung vom $T_e^{-0.5}$ -Gesetz für $T_e < 1200$ K.

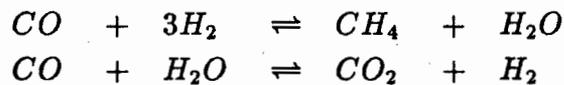
Marconi und Mendis 1988 [32] zeigen weiter, daß die NH_3 -Konzentration noch wesentlich geringer sein kann bis hin zur völligen Abwesenheit von NH_3 , wenn der solare Strahlungsfluß, insbesondere im Bereich J_3 ($\lambda \leq 98.4\text{nm}$, siehe 4.2.5),

erheblich erhöht war. Die Strahlung in diesem Wellenlängenbereich ist vor allem für die Ionisation von H_2O verantwortlich. Eine Erhöhung der Ionisationsrate von H_2O bewirkt einen Anstieg der Masse 18 AME und der Elektronendichte. Das durch die Reaktion von H_2O^+ mit H_2O gebildete H_3O^+ wird durch die schnelle dissoziative Rekombination abgebaut, so daß sich insgesamt ein geringeres 19/18 AME-Verhältnis ergibt. Erhöht man die solaren Strahlungsflüsse in den Bereichen J_1 ($\lambda \leq 186$ nm) und J_2 ($\lambda \leq 145$ nm) um den Faktor 2 und im Bereich J_3 um den Faktor 10, so sinkt das berechnete 19/18 AME-Verhältnis auf Werte, die nur noch eine NH_3 -Konzentration zwischen 0 und $< 1\%$ zulassen. Die völlige Abwesenheit von NH_3 wäre allerdings unwahrscheinlich, da durch erdgebundene Beobachtungen (Spektrophotometrie) NH_2 nachgewiesen wurde (Wyckoff et al. 1988 [36]). Plausibelste Quelle für NH_2 ist das NH_3 . Wyckoff et al. 1988 [36] leiten aus ihren NH_2 -Beobachtungen ein $NH_3 : H_2O$ -Verhältnis von 0.004 ± 0.002 ab, ebenfalls einen Wert kleiner 1%. Dies könnte darauf hindeuten, daß der solare Strahlungsfluß zum Zeitpunkt der GIOTTO-Mission nicht dem „normalen“ für das solare Minimum entsprach.

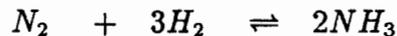
Zur Methan-Konzentration liegen ebenfalls Messungen (IR-Spektrometrie, Kuiper Airborne Observatory) vor (Drapatz et al. 1986 [37]). Diese Autoren geben eine, mit den Modellrechnungen verträgliche, obere Grenze der CH_4 -Konzentration von $\leq 4\%$ an.

4.7 Zusammenhang zwischen chemischer Zusammensetzung und Ursprung der Kometen

Die Häufigkeiten von Methan und Ammoniak in den Kometen können wichtige Hinweise auf den Ursprung und die Bedingungen (Druck und Temperatur) bei der Bildung der Kometen geben. In einem Gasgemisch solarer Elementhäufigkeiten wird die Kohlenstoffchemie, in der Gasphase, durch CO , CH_4 und CO_2 bestimmt. Diese drei Gase werden durch chemische Reaktionen ineinander umgewandelt. Die Netto-Reaktionen sind:



Die Stickstoffchemie, unter den oben genannten Bedingungen, wird bestimmt durch die Reaktion.



Allen drei Reaktionen ist gemeinsam, daß sich, bei konstantem Druck und abnehmender Temperatur, das chemische Gleichgewicht zur rechten Seite hin verschiebt. Dies bedeutet, daß die Verhältnisse CO/CH_4 , CO/CO_2 und N_2/NH_3 mit sinkender Temperatur abnehmen, sofern sich chemisches Gleichgewicht einstellen kann. Allerdings sind alle drei Reaktionen kinetisch gehemmt, d.h. die Produkte der rechten Seite sind zwar energetisch günstiger als die Edukte, jedoch ist die Aktivierungsenergie die aufgebracht werden muß, um die Reaktionen zu ermöglichen, sehr hoch. Dies bewirkt, daß die Reaktionsraten generell klein sind und mit sinkender Temperatur noch weiter abnehmen. Das Ausmaß mit dem diese drei Reaktionen CO zu CH_4 , CO zu CO_2 und N_2 zu NH_3 bei abnehmender Temperatur umwandeln, wird einerseits durch die Raten der einzelnen Reaktionen bestimmt, andererseits durch die Rate mit der sich der solare Nebel durchmischt und abkühlt. Betrachtet man die Zeitskalen, die sich aus den Reaktionsraten (t_{chem}) und der Vermischungs- und der Abkühlungsrate (t_{mix}) ergibt, so kann sich chemisches Gleichgewicht nur dann einstellen, wenn $t_{chem} \ll t_{mix}$ ist. Da jedoch t_{chem} mit sinkender Temperatur sehr stark zunimmt, wird sich bei einer bestimmten Temperatur $t_{chem} = t_{mix}$ einstellen. Bei dieser Temperatur

(T_Q : quenching temperature) werden dann die Reaktionen so langsam ablaufen, daß die Edukt/Produkt-Verhältnisse praktisch eingefroren werden. Für die Druckabhängigkeit gilt, daß mit abnehmendem Druck die Temperatur T_Q und die Edukt/Produkt-Verhältnisse ansteigen (Fegley und Prinn 1988 [38]). In Gebieten des solaren Nebels mit niedrigem Druck werden die CO - CH_4 und N_2 - NH_3 Umwandlungen schon bei relativ hoher Temperatur abgebrochen, so daß sich für die Verhältnisse $CO/CH_4 \approx 10^7$ und $N_2/NH_3 \approx 170$ ergibt (Fegley und Prinn 1988 [38]). Anders ist die Situation in Gebieten mit höherem Druck, wie im Subnebel der Riesenplaneten Proto-Jupiter und Proto-Saturn. Hier erwartet man, daß $CO/CH_4 \approx 10^{-6}$ und $N_2/NH_3 \approx 5 \cdot 10^{-4}$ ist (Fegley und Prinn 1988 [38]). Die unterschiedlichen Bedingungen in den beiden genannten Regionen des solaren Nebels wirken sich auch auf die Kondensationsprozesse aus. Der höhere Druck im Subnebel der Riesenplaneten ermöglicht die Bildung von CH_4 -Clathraten ($CH_4 \cdot 6H_2O$), während der viel geringere Druck im solaren Nebel zur kinetischen Hemmung der CO - und N_2 -Clathraten-Bildung führt (Fegley und Prinn 1988 [38]). Betrachtet man die entsprechenden Häufigkeiten der flüchtigen Bestandteile des Kometen Halley:

CO/H_2O	= 0.05 - 0.07 ¹ - 0.15 ²	(Eberhardt et al. 1987 [7])
CH_4/H_2O	= 0.03	(diese Arbeit)
NH_3/H_2O	= 0.02 - 0.025	(diese Arbeit)
NH_3/H_2O	< 0.01	(Marconi und Mendis 1988 [32])
N_2/H_2O	< 0.1	(Eberhardt et al. 1987 [7])
N_2/H_2O	< 0.02	(Allen et al. 1987 [30])

so erhält man Verhältnisse $CO/CH_4 = 1.7-2.3^1-5^2$ und $N_2/NH_3 < 1.0-5.0$, die weder mit den Erwartungen für den solaren Nebel ($CO/CH_4 \gg 1$, $N_2/NH_3 \gg 1$), noch mit denen für den Subnebel der Proto-Riesenplaneten ($CO/CH_4 \ll 1$, $N_2/NH_3 \ll 1$) kompatibel sind. Fegley und Prinn (1988 [38]) schlagen deshalb ein Modell vor, in dem Halley aus einer Mischung von zwei Komponenten besteht. Die eine Komponente (etwa 10%) besteht aus reduziertem CH_4 - und NH_3 -reichem Material aus dem Subnebel der Riesenplaneten, die zweite Komponente aus oxidiertem CO - und N_2 -reichem Material des solaren Nebels

¹Direkt vom Kern abströmendes CO . Das ungewöhnliche Dichteprofil der Masse 28 zeigt, daß es eine ausgedehnte CO -Quelle in der Koma gibt (Eberhardt et al. 1987 [7]).

²Mit dem CO der ausgedehnten Quelle.

und/oder des interstellaren Mediums. Die Vermischung geschah durch Kollisionen von Eis-reichen Objekten des Sonnensystems mit Objekten aus dem Gebiet der Riesenplaneten. Die resultierenden Körper würden dann eine Mischung aus CO , CH_4 , N_2 und NH_3 enthaltenden Eiseisen aufweisen. Das Modell erklärt somit die beobachteten Häufigkeiten der flüchtigen Bestandteile und das Vorkommen von CO -Eis (aus dem solaren Nebel) und CH_4 -Clathraten (aus dem Subnebel der Riesenplaneten) in den Kometen.

5 ZUSAMMENFASSUNG

Das Neutral-Massenspektrometer-Experiment (NMS) war eines von zehn Experimenten der GIOTTO -Sonde, die am 13. März 1986 die Koma des Halley'schen Kometen durchflog. Einer der beiden Sensoren des NMS-Experiments ist ein Energieanalysator, der es gestattet, die Energieverteilung von Ionen und Gasen zu messen. Aufgrund der hohen Relativgeschwindigkeit zwischen Komet und Sonde von 68.373 km/s ist die Energie der Teilchen masseabhängig. Das Energiespektrum ist gleichzeitig ein Massenspektrum.

Ziel der Auswertung war zunächst die Berechnung der Partialdichten, der Temperatur und der Abströmgeschwindigkeit der Ionen aus den gemessenen Energiespektren. Das Auswerteverfahren beruht im wesentlichen auf einer nichtlinearen Regression, die iterativ Temperatur, Abströmgeschwindigkeit und die Partialdichten der verschiedenen Massen in einem Rechengang ermittelt. Sowohl Temperatur als auch Abströmgeschwindigkeit der Ionen zeigen, daß in der inneren Koma zwei unterschiedliche Bereiche existieren, die durch die sogenannte Kontaktfläche getrennt sind. Die Kontaktfläche befand sich in einem Abstand von 4600 km vom Kern des Kometen. Innerhalb der Kontaktfläche ist das kometare Plasma „kalt“, etwa 200 K, während an der Kontaktfläche die Temperatur um etwa 1000 K ansteigt. Die Abströmgeschwindigkeit der Ionen betrug etwa 800 m/s innerhalb und ≈ 0 m/s außerhalb der Kontaktfläche.

Ein weiteres Ziel der Ionenanalyse war die Bestimmung der Produktionsraten der Muttermoleküle Ammoniak und Methan. Hierzu wurden die Ionenspektren des Massebereichs 15-19 AME untersucht. Zum Massenspektrum der Ionen in diesem Bereich tragen Tochterprodukte der drei Muttermoleküle H_2O , NH_3 und CH_4 bei. Da ein Teil der Tochterionen (z.B. NH_4^+ und H_2O^+), innerhalb des Auflösungsvermögens des Experiments, gleiche Massen besitzen, sind die gemessenen Massen-Partialdichten die Summe der Dichten dieser Tochterionen. Um aus den gemessenen Ionenspektren die Muttermolekülverhältnisse von

Wasser, Ammoniak und Methan zu bestimmen, wurde ein Modell einer Kometenatmosphäre berechnet. Zu den Modellrechnungen wurden die aus den Spektren ermittelte Abströmgeschwindigkeit und Temperatur herangezogen. Das Modell berücksichtigt die Expansion der Koma, die Absorption der ionisierenden Strahlung in der Kometenkoma sowie die photochemischen und Ionen-Molekül-Reaktionen. Da über die Elektronentemperatur keine in situ Messungen vorliegen, wurde für sie ein konstanter Wert von 250 K angenommen. Für den solaren Strahlungsfluß wurde der Literaturwert für das solare Minimum benutzt. Die Gültigkeit des Modells beschränkt sich auf den Bereich innerhalb der Kontaktfläche, da die Wechselwirkung mit dem Sonnenwind nicht berücksichtigt wurde. Die Modellrechnungen wurden mit verschiedenen Kompositionen der drei Muttermoleküle Wasser, Ammoniak und Methan durchgeführt. Durch Vergleich der berechneten mit den gemessenen Dichteprofilen der Ionen des Massenbereiches 15–19 AME wurde die Methan- und Ammoniak-Konzentrationen in der Koma des Halley'schen Kometen bestimmt.

Für die oben genannten Annahmen ergab sich ein Mischungsverhältnis der drei Muttermoleküle von $H_2O : NH_3 : CH_4 = 100:2.0-2.5:3.0$. Die gefundenen Häufigkeiten von Methan und Ammoniak im Kometen sind für die Frage nach dessen Herkunft von Bedeutung. Nach Überlegungen von Fegley und Prinn 1988 [38] deuten sie auf eine Beimischung von Material aus dem Subnebel der Proto-Riesenplaneten hin.

- [6] Krankowsky D., Lämmerzahl P., Herrwerth I., Woveries J.,
Eberhardt P., Dolder U., Herrmann U., Schulte W.,
Berthelier J. J., Illiano J., Hodges R. R. und Hoffman J. H.
„In situ Gas and Ion Measurements at Comet Halley“
Nature **321**, 326 1986
- [7] Eberhardt P., Krankowsky D., Schulte W., Dolder U., Lämmerzahl P.,
Berthelier J. J., Woveries J., Stubbemann U., Hodges R. R.,
Hoffman J. H. und Illiano J.
„The CO and N₂ abundance in comet P/Halley“
Astronomy & Astrophysics **187**, 481 1987
- [8] 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. und Hoffman J. H.
*„Expansion Velocity and Temperatures of Gas and
Ions measured in the Coma of Comet Halley“*
Astronomy & Astrophysics **187**, 169 1987
- [9] Green T. S. und Proca G. A.
„A Parallel Plate Electrostatic Spectrograph“
Rev. Sci. Instr. **42**, 1409 1970
- [10] Anweiler B.
Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg
persönliche Mitteilung 1984

- [11] Rehm W.
*„Messung der effektiven Ionisierungsenergie
in der Ionenquelle eines Massenspektrometers
für Gasstrahlen von 68km/s“*
Diplomarbeit, Max-Planck-Institut für
Kernphysik, Heidelberg 1986
- [12] Berthelier J. J. C.R.P.E 4, avenue de Neptun
F-94107 Saint-Maur des Fosses, CEDEX
persönliche Mitteilung 1984
- [13] Wolf M.
„Multi-Channel-Plates“
Physik in unserer Zeit 3 1981
- [14] Timothy J. G.
„Curved-Channel Microchannel Array Plates“
Rev. Sci. Instr. 52 1981
- [15] Hodges R.R.
„Operating Manual for the Giotto NMS“
University of Texas at Dallas
[unveröffentlicht] 1985
- [16] Woweries J.
*„Eichung eines Energieanalysators zum Nachweis
von Gasen und Ionen beim Vorbeiflug am
Halley'schen Kometen“*
Diplomarbeit, Max-Planck-Institut für
Kernphysik, Heidelberg 1985

- [17] Lämmerzahl P.
„Energy scale of the NMS E-Analyser as calibrated in the GEOS chamber“
[unveröffentlicht] 1986
- [18] Ghielmetti A. G., Balsiger H., Bänninger R., Eberhardt P., Geiss J. und Young D. T.
„Calibration system for satellite and rocket-borne ion mass spectrometer in the energy-range from 5 eV/charge to 100 keV/charge.“
Rev. Sci. Instr. 54 1983
- [19] Dolder U.
„Der Massenanalysator des Neutralmassenspektrometers Giotto NMS. Eichungen und erste Ergebnisse“
Dissertation Universität Bern 1984
- [20] Green T.S. und Proca G.A.
„Minimum Imagesize in a Parallel Plate Electrostatic Spectrograph“
Rev. Sci. Instr. 41,178 1970
- [21] Anweiler B.
Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg
persönliche Mitteilung 1986

- [22] Pitha J., Jones N.R.
*„A Comparison of Optimization Methods for
Fitting Curves to Infrared Band Envelopes“*
Canadian Journal of Chemistry 44,3031 1966
- [23] Neubauer F.M., Glassmeier K. H., Pohl M., Raeder J.,
Acuna M. H., Burlaga L. F., Ness N. F., Musmann G.,
Mariani F., Wallis M. K., Ungstrup E. und Schmidt H. U.
*„First Results from the Giotto Magnetometer
Experiment at Comet Halley“*
Nature 321, 352 1986
- [24] Huebner W.F.
„The Photochemistry of Comets“
In *„The Photochemistry of Atmospheres “*
Academic Press, New York 1985
- [25] Huebner W.F. und Fikani M.M.
„Comet Halley, Parameter Study I“
Los Alamos National Laboratory 1982
- [26] Huntress W.T. und Anicich V.G
*„A Survey of Bimolekular Ion-Molecule Reactions
for use in Modeling the Chemistry of Planetary
Atmospheres, Cometary Comae, and Interstellar Clouds“*
Astrophysical Journal
Supplements Vol. 62 No. 3 1986

- [27] Marconi M.L. und Mendis D.A.
 „*The Atmosphere of a Dirty-Clathrate Cometary Nucleus: A Two-Phase, Multifluid Model*“
 Astrophysical Journal **273**, 381 1983
- [28] Giguere P.T. und Huebner W.F.
 „*A Model of Comet Comae. I. Gas-Phase Chemistry in one Dimension*“
 Astrophysical Journal **223**, 638 1978
- [29] Gear W.C.
 „*Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*“
 Prentice Hall, Eaglewood Cliffs, N. J. 1971
- [30] Allen M., Delitsky M., Huntress W., Yung Y., Ip W. H.,
 Schwenn R., Rosenbauer H., Shelley E., Balsiger H. und Geiss J.
 „*Evidence for Methane and Ammonia in the coma of comet P/Halley*“
 Astronomy & Astrophysics **187**, 502 1987
- [31] Balsiger H., Altwegg K., Bühler F., Geiss J., Ghielmetti A.G.,
 Goldstein B. E., Goldstein R., Huntress W.T., Ip W.H.,
 Lazarus A.J., Meier A., Neugebauer M., Rettenmund U.,
 Rosenbauer H., Schwenn R., Sharp R.D., Benson J., Shelley E. G.,
 Ungstrup E. und Young D. T.
 „*Ion composition and dynamics at comet Halley*“
 Nature **321**, 330 1986

- [32] Marconi M.L. und Mendis D.A.
„On the ammonia abundance in the coma of
Halley's comet“
Astrophysical Journal **330**, 513 1988
- [33] McGowan J.Wm., Mul P.M., D'Angelo V.S., Mitchell J.B.A.
Defrance P., und Froehlich H.R.
„Energy dependence of dissociative Recombination
below 0.08 eV measured with [electron-ion]
merged beam technique“
Phys. Rev. Letters **42**,373,erratum 1186 1979
- [34] Heppner R.A., Walls F.L., Armstrong F.L. und Dunn G.H.
„Cross-section measurements for electron- H_3O^+
recombinations“
Phys. Rev. A **13**,1000 1976
- [35] Alge E., Adams N.G. und Smith D.
„Measurement of the dissociative recombination
coefficients of O_2^+ , NO^+ and NH_4^+ in the
temperature range 200-600 K“
J. Phys. B:At. Mol. Phys. **16**,1433 1983
- [36] Wyckhoff S., Wehinger P.A., Spinrad H. und Belton M.J.S.
„Abundances in comet Halley at the time
of the spacecraft encounters“
Astrophysical Journal **325**, 927 1988

- [37] Drapatz S., Larson H.P., Davis D.S.,
„Search for methane in comet Halley“
 Proc. 20th ESLAB Symp. Exploration of
 Halley's comet.
 ESA SP-250 1986
- [38] Fegley Jr. B. und Prinn R.G.
*„Solar nebula chemistry: implications for
 volatiles in the solar system“*
 In: *„The formation and evolution of planetary
 systems“*
 [eds. Weaver H.A., Paresce F. und Danly L.]
 Cambridge University Press 1988
- [39] Krankowsky D.
 Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg
 persönliche Mitteilung 1989
- [40] Körösmezey A., Cravens T.E., Gombosi T.I., Nagy A.F.,
 Mendis D.A., Szege K., Gribov B.E., Sagdeev R.Z.,
 Shapiro V.D. und Shevchenko V.I.
„A new model of cometary ionospheres“
 J. Geophys. Res. A, **92**,7331 1987
- [41] Oort J.H.
*„The structure of the cloud of comets
 surrounding the solar system and a
 hypothesis concerning its origin“*
 Bull. Astron. Inst. Netherland **11**,91 1950

- [42] Eberhardt P., Dolder U., Schulte W., Krankowsky D., Lämmerzahl P., Hoffman J. H., Hodges R. R., Berthelier J. J. und Illiano J.
„The D/H ratio in water from comet P/Halley“
Astronomy & Astrophysics 187, 435 1987
- [43] Geiss J.
„Composition in Halley's comet: Clues to origin and history of cometary matter“
In: *„Reviews in Modern Astronomy Vol. 1 Cosmic Chemistry“*
[editor Klare G.]
Springer Berlin, Heidelberg 1988
- [44] Mul P.M., McGowan J.Wm. DeFrance P. und Mitchell J.B.A.
„Merged electron-ion beam experiments: V Dissoziative recombination of OH^+ , H_2O^+ , H_3O^+ , and D_3O^+ .“
J. Phys. B:At. Mol. Phys. 16,3099 1983

7 ANHANG

7.1 Reaktionsgleichungen

Einheit für die Ratenkoeffizienten der photolytischen Reaktionen ist $[s^{-1}]$, für die der anderen Reaktionen $[cm^3 s^{-1}]$. Bei allen indizierten Ratenkoeffizienten wurde die wellenlängenabhängige Absorption in der Kometenkoma berücksichtigt. Die Indizes beziehen sich auf die in Kapitel 4.2.5 genannten drei Wellenlängenbereiche.

Photodissoziation					
	Reaktion			Ratenkoeffizient	Referenz
1.	H_2O	$\rightarrow H$	+ OH	$1.26 \cdot 10^{-5[1]}$	[24]
2.	H_2O	$\rightarrow H_2$	+ O	$1.78 \cdot 10^{-6[2]}$	[24]
3.	OH	$\rightarrow H$	+ O	$6.31 \cdot 10^{-6}$	[27]
4.	H_2	$\rightarrow H$	+ H	$5.56 \cdot 10^{-8[2]}$	[24]
5.	NH_3	$\rightarrow NH_2$	+ H	$2.15 \cdot 10^{-4}$	[24]
6.	NH_3	$\rightarrow NH$	+ H_2	$4.67 \cdot 10^{-6}$	[24]
7.	NH_2	$\rightarrow NH$	+ H	$2.27 \cdot 10^{-6}$	[24]
8.	NH_2	$\rightarrow N$	+ H_2	$6.31 \cdot 10^{-7}$	[25]
9.	NH	$\rightarrow N$	+ H	$3.16 \cdot 10^{-6}$	[25]
10.	CH_4	$\rightarrow CH_3$	+ H	$1.51 \cdot 10^{-6}$	[24]
11.	CH_4	$\rightarrow CH_2$	+ H_2	$6.94 \cdot 10^{-6}$	[24]
12.	CH_4	$\rightarrow CH$	+ H_2 + H	$6.31 \cdot 10^{-7}$	[24]
13.	CH_2	$\rightarrow CH$	+ H	$2.53 \cdot 10^{-5}$	[25]
14.	CH	$\rightarrow C$	+ H	$1.51 \cdot 10^{-2}$	[24]

Photoionisation

15.	H_2O	$\longrightarrow H_2O^+$	$+ e^-$	$4.17 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
16.	H_2	$\longrightarrow H_2^+$	$+ e^-$	$6.82 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
17.	H	$\longrightarrow H^+$	$+ e^-$	$9.22 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
18.	O	$\longrightarrow O^+$	$+ e^-$	$2.65 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
19.	NH_3	$\longrightarrow NH_3^+$	$+ e^-$	$7.70 \cdot 10^{-7[2]}$	[24]
20.	N	$\longrightarrow N^+$	$+ e^-$	$2.40 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
21.	CH_4	$\longrightarrow CH_4^+$	$+ e^-$	$4.17 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
22.	CH	$\longrightarrow CH^+$	$+ e^-$	$9.60 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
23.	C	$\longrightarrow C^+$	$+ e^-$	$5.18 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]

Dissoziative Ionisation

24.	H_2O	$\longrightarrow OH^+$	$+ H$	$+ e^-$	$6.94 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
25.	H_2O	$\longrightarrow H^+$	$+ OH$	$+ e^-$	$1.64 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
26.	H_2O	$\longrightarrow O^+$	$+ H_2$	$+ e^-$	$7.32 \cdot 10^{-9[3]}$	[24]
27.	H_2	$\longrightarrow H^+$	$+ H$	$+ e^-$	$1.20 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
28.	NH_3	$\longrightarrow NH_2^+$	$+ H$	$+ e^-$	$2.27 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
29.	NH_3	$\longrightarrow NH^+$	$+ H_2$	$+ e^-$	$8.71 \cdot 10^{-9[3]}$	[24]
30.	NH_3	$\longrightarrow H^+$	$+ NH_2$	$+ e^-$	$4.17 \cdot 10^{-9[3]}$	[24]
31.	NH_3	$\longrightarrow N^+$	$+ H_2$	$+ H + e^-$	$4.17 \cdot 10^{-9[3]}$	[24]
32.	CH_4	$\longrightarrow CH_3^+$	$+ H$	$+ e^-$	$2.53 \cdot 10^{-7[3]}$	[24]
33.	CH_4	$\longrightarrow CH_2^+$	$+ H_2$	$+ e^-$	$2.65 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]
34.	CH_4	$\longrightarrow CH^+$	$+ H_2$	$+ H + e^-$	$5.30 \cdot 10^{-9[3]}$	[24]
35.	CH_4	$\longrightarrow H^+$	$+ CH_3$	$+ e^-$	$1.15 \cdot 10^{-8[3]}$	[24]

Dissoziative Rekombination

36.	H_3O^+	$+ e^-$	$\longrightarrow H_2O$	$+ H$	$2.33 \cdot 10^{-7}$	[27]	
37.	H_3O^+	$+ e^-$	$\longrightarrow OH$	$+ H_2$	$2.33 \cdot 10^{-7}$	[27]	
38.	H_3O^+	$+ e^-$	$\longrightarrow OH$	$+ H$	$+ H$	$2.33 \cdot 10^{-7}$	[27]
39.	H_2O^+	$+ e^-$	$\longrightarrow OH$	$+ H$	$5.32 \cdot 10^{-7}$	[27]	
40.	H_2O^+	$+ e^-$	$\longrightarrow O$	$+ H_2$	$1.50 \cdot 10^{-7}$	[27]	
41.	OH^+	$+ e^-$	$\longrightarrow O$	$+ H$	$8.20 \cdot 10^{-8}$	[25]	
42.	H_2^+	$+ e^-$	$\longrightarrow H$	$+ H$	$1.00 \cdot 10^{-7}$	[25]	
43.	NH_4^+	$+ e^-$	$\longrightarrow NH_3$	$+ H$	$1.17 \cdot 10^{-6}$	[25]	

44.	NH_4^+	+	e^-	\rightarrow	NH_2	+	H	+	H	$1.30 \cdot 10^{-7}$	[25]
45.	NH_3^+	+	e^-	\rightarrow	NH_2	+	H			$1.00 \cdot 10^{-7}$	[25]
46.	NH_3^+	+	e^-	\rightarrow	NH	+	H_2			$1.00 \cdot 10^{-7}$	[25]
47.	NH_3^+	+	e^-	\rightarrow	NH	+	H	+	H	$1.90 \cdot 10^{-7}$	[25]
48.	NH_2^+	+	e^-	\rightarrow	NH	+	H			$3.00 \cdot 10^{-7}$	[25]
49.	NH^+	+	e^-	\rightarrow	N	+	H			$1.08 \cdot 10^{-7}$	[25]
50.	CH_5^+	+	e^-	\rightarrow	CH_4	+	H			$7.00 \cdot 10^{-7}$	[25]
51.	CH_4^+	+	e^-	\rightarrow	CH_3	+	H			$1.20 \cdot 10^{-7}$	[25]
52.	CH_4^+	+	e^-	\rightarrow	CH_2	+	H_2			$1.20 \cdot 10^{-7}$	[25]
53.	CH_4^+	+	e^-	\rightarrow	CH	+	H_2	+	H	$1.20 \cdot 10^{-7}$	[25]
54.	CH_4^+	+	e^-	\rightarrow	CH	+	H	+	$H + H$	$1.20 \cdot 10^{-7}$	[25]
55.	CH_3^+	+	e^-	\rightarrow	CH_2	+	H			$2.53 \cdot 10^{-7}$	[25]
56.	CH_3^+	+	e^-	\rightarrow	CH	+	H_2			$2.54 \cdot 10^{-7}$	[25]
57.	CH_3^+	+	e^-	\rightarrow	CH	+	H	+	H	$2.53 \cdot 10^{-7}$	[25]
58.	CH_2^+	+	e^-	\rightarrow	CH	+	H			$5.10 \cdot 10^{-7}$	[25]
59.	CH_2^+	+	e^-	\rightarrow	C	+	H_2			$5.10 \cdot 10^{-7}$	[25]
60.	CH^+	+	e^-	\rightarrow	C	+	H			$1.00 \cdot 10^{-7}$	[25]

Rekombination

61.	H^+	+	e^-	\rightarrow	H					$3.50 \cdot 10^{-12}$	[25]
62.	O^+	+	e^-	\rightarrow	O					$3.50 \cdot 10^{-12}$	[25]
63.	N^+	+	e^-	\rightarrow	N					$3.50 \cdot 10^{-12}$	[25]
64.	C^+	+	e^-	\rightarrow	C					$3.50 \cdot 10^{-12}$	[25]
65.	CH^+	+	e^-	\rightarrow	CH					$1.05 \cdot 10^{-10}$	[25]

Ladungsaustausch

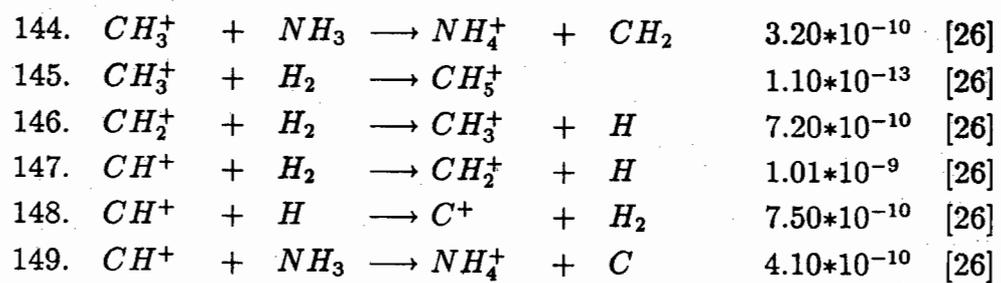
66.	H_2O^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	H_2O			$2.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
67.	OH^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	OH			$1.59 \cdot 10^{-9}$	[26]
68.	OH^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	OH			$1.19 \cdot 10^{-9}$	[26]
69.	O^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	O			$2.30 \cdot 10^{-9}$	[26]
70.	O^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	O			$1.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
71.	O^+	+	CH_4	\rightarrow	CH_4^+	+	O			$8.90 \cdot 10^{-10}$	[26]
72.	O^+	+	OH	\rightarrow	OH^+	+	O			$3.00 \cdot 10^{-10}$	[25]
73.	O^+	+	H	\rightarrow	H^+	+	O			$6.00 \cdot 10^{-10}$	[26]
74.	NH_2^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	NH_2			$1.45 \cdot 10^{-9}$	[26]
75.	NH^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	NH			$1.17 \cdot 10^{-9}$	[26]

76.	NH^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	NH	$1.80 \cdot 10^{-9}$	[26]
77.	N^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	N	$2.80 \cdot 10^{-9}$	[26]
78.	N^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	N	$1.97 \cdot 10^{-9}$	[26]
79.	N^+	+	CH_4	\rightarrow	CH_4^+	+	N	$7.20 \cdot 10^{-11}$	[26]
80.	N^+	+	O	\rightarrow	O^+	+	N	$1.00 \cdot 10^{-12}$	[25]
81.	CH_4^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	CH_4	$1.60 \cdot 10^{-9}$	[26]
82.	CH^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	CH	$4.60 \cdot 10^{-10}$	[26]
83.	C^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	C	$1.15 \cdot 10^{-9}$	[26]
84.	C^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	C	$2.40 \cdot 10^{-10}$	[26]
85.	H_2^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	H_2	$3.87 \cdot 10^{-9}$	[26]
86.	H_2^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	H_2	$5.70 \cdot 10^{-9}$	[26]
87.	H_2^+	+	CH_4	\rightarrow	CH_4^+	+	H_2	$1.41 \cdot 10^{-9}$	[26]
88.	H^+	+	H_2O	\rightarrow	H_2O^+	+	H	$8.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
89.	H^+	+	OH	\rightarrow	OH^+	+	H	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
90.	H^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_3^+	+	H	$5.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
91.	H^+	+	CH_4	\rightarrow	CH_4^+	+	H	$1.52 \cdot 10^{-9}$	[26]
92.	H^+	+	O	\rightarrow	O^+	+	H	$3.75 \cdot 10^{-10}$	[26]

Ionen-Molekülreaktionen

93.	H_3O^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_4^+	+	H_2O	$2.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
94.	H_3O^+	+	NH_2	\rightarrow	NH_3^+	+	H_2O	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
95.	H_3O^+	+	CH_2	\rightarrow	CH_3^+	+	H_2O	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
96.	H_3O^+	+	CH	\rightarrow	CH_2^+	+	H_2O	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
97.	H_2O^+	+	H_2O	\rightarrow	H_3O^+	+	OH	$2.05 \cdot 10^{-9}$	[26]
98.	H_2O^+	+	H_2	\rightarrow	H_3O^+	+	H	$8.30 \cdot 10^{-10}$	[26]
99.	H_2O^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_4^+	+	OH	$1.05 \cdot 10^{-9}$	[26]
100.	H_2O^+	+	NH_2	\rightarrow	NH_3^+	+	OH	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
101.	H_2O^+	+	CH_4	\rightarrow	H_3O^+	+	CH_3	$1.11 \cdot 10^{-9}$	[26]
102.	H_2O^+	+	CH_2	\rightarrow	CH_3^+	+	OH	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
103.	H_2O^+	+	CH	\rightarrow	CH_2^+	+	OH	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
104.	H_2O^+	+	C	\rightarrow	CH^+	+	OH	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
105.	OH^+	+	H_2O	\rightarrow	H_3O^+	+	O	$1.59 \cdot 10^{-9}$	[26]
106.	OH^+	+	OH	\rightarrow	H_2O^+	+	O	$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
107.	OH^+	+	H_2	\rightarrow	H_2O^+	+	H	$1.05 \cdot 10^{-9}$	[26]
108.	OH^+	+	NH_3	\rightarrow	NH_4^+	+	O	$1.19 \cdot 10^{-9}$	[26]
109.	OH^+	+	CH_4	\rightarrow	H_3O^+	+	CH_2	$1.40 \cdot 10^{-9}$	[26]

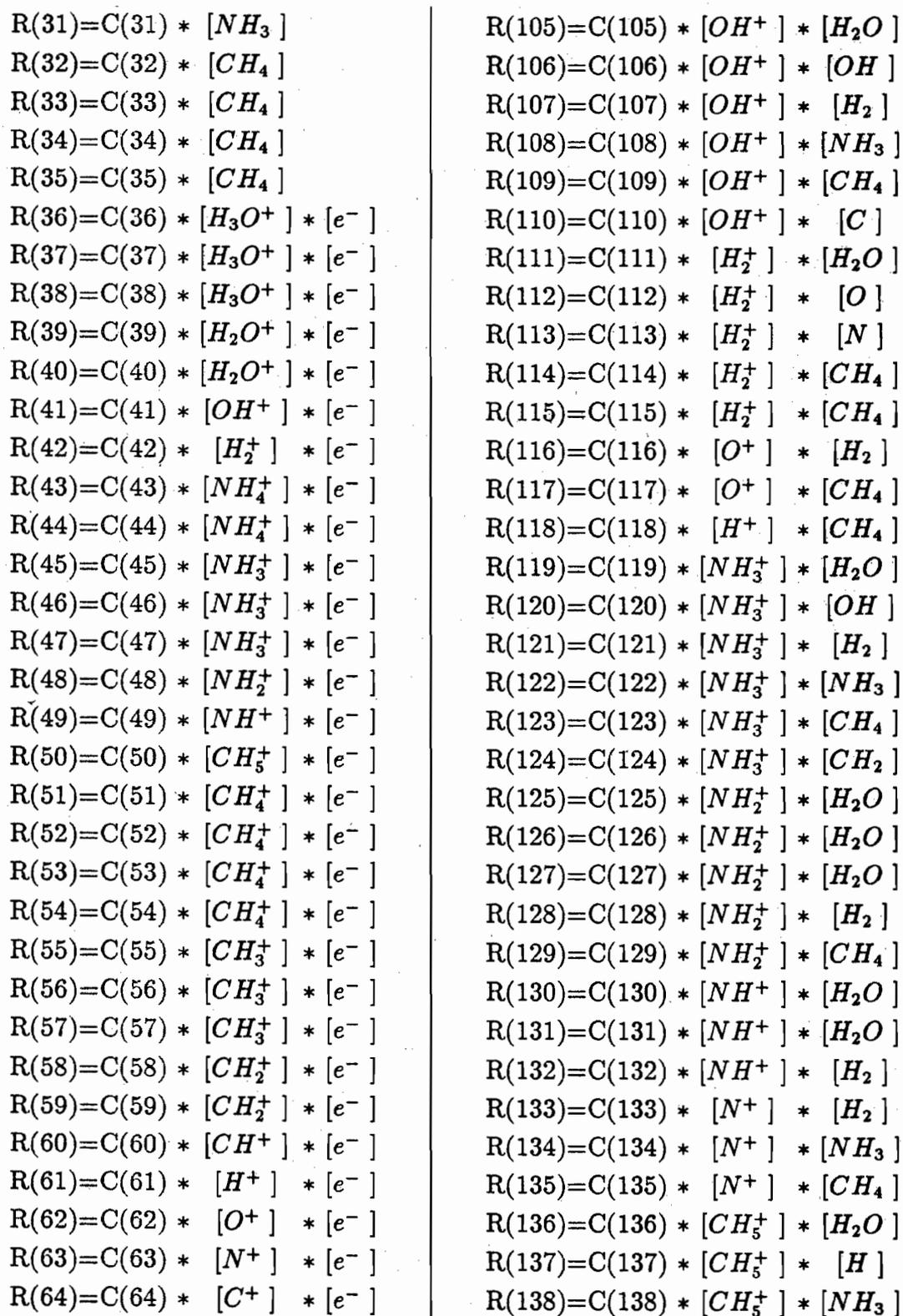
110.	OH^+	+	C	\longrightarrow	CH^+	+	O		$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
111.	H_2^+	+	H_2O	\longrightarrow	H_3O^+	+	H		$3.43 \cdot 10^{-9}$	[26]
112.	H_2^+	+	O	\longrightarrow	OH^+	+	H		$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
113.	H_2^+	+	N	\longrightarrow	NH^+	+	H		$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
114.	H_2^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_5^+	+	H		$1.27 \cdot 10^{-10}$	[26]
115.	H_2^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_3^+	+	H_2	+	H	$2.28 \cdot 10^{-9}$ [26]
116.	O^+	+	H_2	\longrightarrow	OH^+	+	H		$1.58 \cdot 10^{-9}$	[26]
117.	O^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_3^+	+	OH		$1.10 \cdot 10^{-10}$	[26]
118.	H^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_3^+	+	H_2		$3.69 \cdot 10^{-9}$	[26]
119.	NH_3^+	+	H_2O	\longrightarrow	NH_4^+	+	OH		$1.10 \cdot 10^{-10}$	[26]
120.	NH_3^+	+	OH	\longrightarrow	NH_4^+	+	O		$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
121.	NH_3^+	+	H_2	\longrightarrow	NH_4^+	+	H		$4.50 \cdot 10^{-13}$	[26]
122.	NH_3^+	+	NH_3	\longrightarrow	NH_4^+	+	NH_2		$2.20 \cdot 10^{-9}$	[26]
123.	NH_3^+	+	CH_4	\longrightarrow	NH_4^+	+	CH_3		$4.80 \cdot 10^{-10}$	[26]
124.	NH_3^+	+	CH_2	\longrightarrow	NH_4^+	+	CH		$1.00 \cdot 10^{-9}$	[25]
125.	NH_2^+	+	H_2O	\longrightarrow	H_3O^+	+	NH		$1.58 \cdot 10^{-9}$	[26]
126.	NH_2^+	+	H_2O	\longrightarrow	NH_3^+	+	OH		$1.02 \cdot 10^{-10}$	[26]
127.	NH_2^+	+	H_2O	\longrightarrow	NH_4^+	+	O		$3.40 \cdot 10^{-11}$	[26]
128.	NH_2^+	+	H_2	\longrightarrow	NH_3^+	+	H		$2.70 \cdot 10^{-10}$	[26]
129.	NH_2^+	+	CH_4	\longrightarrow	NH_3^+	+	CH_3		$9.20 \cdot 10^{-10}$	[26]
130.	NH^+	+	H_2O	\longrightarrow	H_3O^+	+	N		$1.17 \cdot 10^{-9}$	[26]
131.	NH^+	+	H_2O	\longrightarrow	NH_2^+	+	OH		$8.80 \cdot 10^{-10}$	[26]
132.	NH^+	+	H_2	\longrightarrow	NH_2^+	+	H		$1.28 \cdot 10^{-9}$	[26]
133.	N^+	+	H_2	\longrightarrow	NH^+	+	H		$4.80 \cdot 10^{-10}$	[26]
134.	N^+	+	NH_3	\longrightarrow	NH_2^+	+	NH		$2.40 \cdot 10^{-10}$	[26]
135.	N^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_3^+	+	NH		$6.24 \cdot 10^{-10}$	[26]
136.	CH_5^+	+	H_2O	\longrightarrow	H_3O^+	+	CH_4		$3.70 \cdot 10^{-9}$	[26]
137.	CH_5^+	+	H	\longrightarrow	CH_4^+	+	H_2		$1.50 \cdot 10^{-10}$	[26]
138.	CH_5^+	+	NH_3	\longrightarrow	NH_4^+	+	CH_4		$2.50 \cdot 10^{-9}$	[26]
139.	CH_5^+	+	O	\longrightarrow	H_3O^+	+	CH_2		$2.60 \cdot 10^{-10}$	[26]
140.	CH_4^+	+	H_2O	\longrightarrow	H_3O^+	+	CH_3		$2.50 \cdot 10^{-9}$	[26]
141.	CH_4^+	+	H_2	\longrightarrow	CH_5^+	+	H		$4.10 \cdot 10^{-11}$	[26]
142.	CH_4^+	+	NH_3	\longrightarrow	NH_4^+	+	CH_3		$1.49 \cdot 10^{-9}$	[26]
143.	CH_4^+	+	CH_4	\longrightarrow	CH_5^+	+	CH_3		$1.14 \cdot 10^{-9}$	[26]

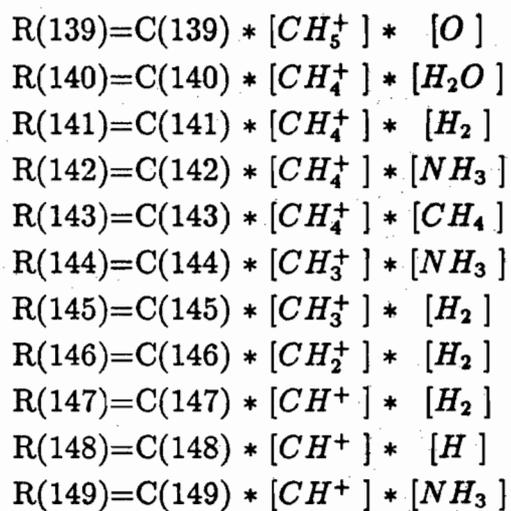
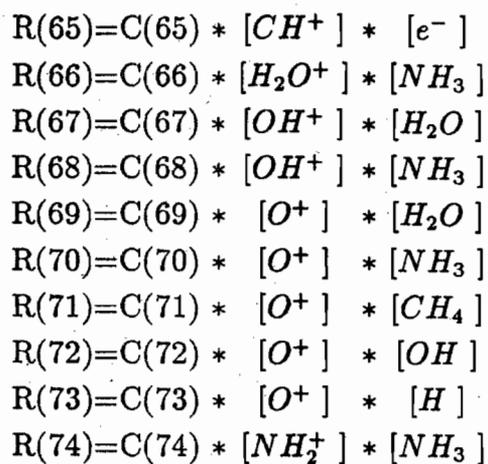


7.2 Die Ratengleichungen der Reaktionen

R(i) sind die Reaktionsraten, C(i) die Ratenkoeffizienten der Reaktion i von Anhang 7.1.

R(1) = C(1) * [H ₂ O]	R(75) = C(75) * [NH ⁺] * [H ₂ O]
R(2) = C(2) * [H ₂ O]	R(76) = C(76) * [NH ⁺] * [NH ₃]
R(3) = C(3) * [OH]	R(77) = C(77) * [N ⁺] * [H ₂ O]
R(4) = C(4) * [H ₂]	R(78) = C(78) * [N ⁺] * [NH ₃]
R(5) = C(5) * [NH ₃]	R(79) = C(79) * [N ⁺] * [CH ₄]
R(6) = C(6) * [NH ₃]	R(80) = C(80) * [N ⁺] * [O]
R(7) = C(7) * [NH ₂]	R(81) = C(81) * [CH ₄ ⁺] * [NH ₃]
R(8) = C(8) * [NH ₂]	R(82) = C(82) * [CH ⁺] * [NH ₃]
R(9) = C(9) * [NH]	R(83) = C(83) * [C ⁺] * [NH ₃]
R(10) = C(10) * [CH ₄]	R(84) = C(84) * [C ⁺] * [H ₂ O]
R(11) = C(11) * [CH ₄]	R(85) = C(85) * [H ₂ ⁺] * [H ₂ O]
R(12) = C(12) * [CH ₄]	R(86) = C(86) * [H ₂ ⁺] * [NH ₃]
R(13) = C(13) * [CH ₂]	R(87) = C(87) * [H ₂ ⁺] * [CH ₄]
R(14) = C(14) * [CH]	R(88) = C(88) * [H ⁺] * [H ₂ O]
R(15) = C(15) * [H ₂ O]	R(89) = C(89) * [H ⁺] * [OH]
R(16) = C(16) * [H ₂]	R(90) = C(90) * [H ⁺] * [NH ₃]
R(17) = C(17) * [H]	R(91) = C(91) * [H ⁺] * [CH ₄]
R(18) = C(18) * [O]	R(92) = C(92) * [H ⁺] * [O]
R(19) = C(19) * [NH ₃]	R(93) = C(93) * [H ₃ O ⁺] * [NH ₃]
R(20) = C(20) * [N]	R(94) = C(94) * [H ₃ O ⁺] * [NH ₂]
R(21) = C(21) * [CH ₄]	R(95) = C(95) * [H ₃ O ⁺] * [CH ₂]
R(22) = C(22) * [CH]	R(96) = C(96) * [H ₃ O ⁺] * [CH]
R(23) = C(23) * [C]	R(97) = C(97) * [H ₂ O ⁺] * [H ₂ O]
R(24) = C(24) * [H ₂ O]	R(98) = C(98) * [H ₂ O ⁺] * [H ₂]
R(25) = C(25) * [H ₂ O]	R(99) = C(99) * [H ₂ O ⁺] * [NH ₃]
R(26) = C(26) * [H ₂ O]	R(100) = C(100) * [H ₂ O ⁺] * [NH ₂]
R(27) = C(27) * [H ₂]	R(101) = C(101) * [H ₂ O ⁺] * [CH ₄]
R(28) = C(28) * [NH ₃]	R(102) = C(102) * [H ₂ O ⁺] * [CH ₂]
R(29) = C(29) * [NH ₃]	R(103) = C(103) * [H ₂ O ⁺] * [CH]
R(30) = C(30) * [NH ₃]	R(104) = C(104) * [H ₂ O ⁺] * [C]





7.3 Das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{d[H_2O]}{dt} = & -R(1) - R(2) - R(15) - R(24) - R(25) - R(26) - R(67) - R(69) \\ & - R(75) - R(77) - R(84) - R(85) - R(88) - R(97) - R(105) \\ & - R(111) - R(119) - R(125) - R(126) - R(127) - R(130) \\ & - R(131) - R(136) - R(140) + R(36) + R(66) + R(93) + R(94) \\ & + R(95) + R(96) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[H]}{dt} = & -R(17) - R(73) - R(137) - R(148) + R(1) + R(3) + R(4) + R(4) \\ & + R(5) + R(7) + R(9) + R(10) + R(12) + R(13) + R(14) + R(24) \\ & + R(27) + R(28) + R(31) + R(32) + R(34) + R(36) + R(38) \\ & + R(38) + R(39) + R(41) + R(42) + R(42) + R(43) + R(44) \\ & + R(44) + R(45) + R(47) + R(47) + R(48) + R(49) + R(50) \\ & + R(51) + R(53) + R(54) + R(54) + R(54) + R(55) + R(57) \\ & + R(57) + R(58) + R(60) + R(61) + R(88) + R(89) + R(90) \\ & + R(91) + R(92) + R(98) + R(107) + R(111) + R(112) + R(113) \\ & + R(114) + R(115) + R(116) + R(121) + R(128) + R(132) \\ & + R(133) + R(141) + R(146) + R(147) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[OH]}{dt} = & -R(3) - R(72) - R(89) - R(106) - R(120) + R(1) + R(25) + R(37) \\ & + R(38) + R(39) + R(67) + R(68) + R(97) + R(99) + R(100) \\ & + R(102) + R(103) + R(104) + R(117) + R(119) + R(126) + R(131) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[H_2]}{dt} = & -R(4) - R(16) - R(27) - R(98) - R(107) - R(116) - R(121) \\ & - R(128) - R(132) - R(133) - R(141) - R(145) - R(146) - R(147) \\ & + R(2) + R(6) + R(8) + R(11) + R(12) + R(26) + R(29) + R(31) \\ & + R(33) + R(34) + R(37) + R(40) + R(46) + R(52) + R(53) + R(56) \\ & + R(59) + R(85) + R(86) + R(87) + R(115) + R(118) + R(137) \\ & + R(148) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[O]}{dt} = & -R(18) - R(80) - R(92) - R(112) - R(139) + R(2) + R(3) + R(40) \\ & + R(41) + R(62) + R(69) + R(70) + R(71) + R(72) + R(73) + R(105) \\ & + R(106) + R(108) + R(110) + R(120) + R(127) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[NH_3]}{dt} = & -R(5) - R(6) - R(19) - R(28) - R(29) - R(30) - R(31) - R(66) \\ & - R(68) - R(70) - R(74) - R(76) - R(78) - R(81) - R(82) - R(83) \\ & - R(86) - R(90) - R(93) - R(99) - R(108) - R(122) - R(134) \\ & - R(138) - R(142) - R(144) - R(149) + R(43) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[NH_2]}{dt} = & -R(7) - R(8) - R(94) - R(100) + R(5) + R(30) + R(44) + R(74) \\ & + R(122) + R(45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[NH]}{dt} = & -R(9) + R(6) + R(7) + R(46) + R(47) + R(48) + R(75) + R(76) \\ & + R(125) + R(134) + R(135) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[N]}{dt} = & -R(20) - R(113) + R(8) + R(9) + R(49) + R(63) + R(77) + R(78) \\ & + R(79) + R(80) + R(130) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[CH_4]}{dt} = & -R(10) - R(11) - R(12) - R(21) - R(32) - R(33) - R(34) - R(35) \\ & - R(71) - R(79) - R(87) - R(91) - R(101) - R(109) - R(114) \\ & - R(115) - R(117) - R(118) - R(123) - R(129) - R(135) \\ & - R(143) + R(50) + R(81) + R(136) + R(138) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[CH_3]}{dt} = & +R(10) + R(35) + R(51) + R(101) + R(123) + R(129) + R(140) \\ & + R(142) + R(143) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[CH_2]}{dt} = & -R(13) - R(95) - R(102) - R(124) + R(11) + R(52) + R(55) \\ & + R(109) + R(139) + R(144) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[CH]}{dt} = & -R(14) - R(22) - R(96) - R(103) + R(12) + R(13) + R(53) + R(54) \\ & + R(56) + R(57) + R(58) + R(65) + R(82) + R(124) \end{aligned}$$

$$\frac{d[C]}{dt} = -R(23) - R(104) - R(110) + R(14) + R(59) + R(60) + R(64) \\ + R(83) + R(84) + R(149)$$

$$\frac{d[H_2O^+]}{dt} = -R(39) - R(40) - R(66) - R(97) - R(98) - R(99) - R(100) \\ - R(101) - R(102) - R(103) - R(104) + R(15) + R(67) + R(69) \\ + R(75) + R(77) + R(84) + R(85) + R(88) + R(106) + R(107)$$

$$\frac{d[e^-]}{dt} = -R(36) - R(37) - R(38) - R(39) - R(40) - R(41) - R(42) - R(43) \\ - R(44) - R(45) - R(46) - R(47) - R(48) - R(49) - R(50) - R(51) \\ - R(52) - R(53) - R(54) - R(55) - R(56) - R(57) - R(58) - R(59) \\ - R(60) - R(61) - R(62) - R(63) - R(64) - R(65) + R(15) + R(16) \\ + R(17) + R(18) + R(19) + R(20) + R(21) + R(22) + R(23) + R(24) \\ + R(25) + R(26) + R(27) + R(28) + R(29) + R(30) + R(31) + R(32) \\ + R(33) + R(34) + R(35)$$

$$\frac{d[H_2^+]}{dt} = -R(42) - R(85) - R(86) - R(87) - R(111) - R(112) - R(113) \\ - R(114) - R(115) + R(16)$$

$$\frac{d[H^+]}{dt} = -R(61) - R(88) - R(89) - R(90) - R(91) - R(92) - R(118) + R(17) \\ + R(25) + R(27) + R(30) + R(35) + R(73)$$

$$\frac{d[O^+]}{dt} = -R(62) - R(69) - R(70) - R(71) - R(72) - R(73) - R(116) \\ - R(117) + R(18) + R(26) + R(80) + R(92)$$

$$\frac{d[NH_3^+]}{dt} = -R(45) - R(46) - R(47) - R(119) - R(120) - R(121) - R(122) \\ - R(123) - R(124) + R(19) + R(66) + R(68) + R(70) + R(74) \\ + R(76) + R(78) + R(81) + R(82) + R(83) + R(86) + R(90) + R(94) \\ + R(100) + R(126) + R(128) + R(129)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[N^+]}{dt} &= -R(63) - R(77) - R(78) - R(79) - R(80) - R(133) - R(134) \\ &\quad - R(135) + R(20) + R(31) \\ \frac{d[CH_4^+]}{dt} &= -R(51) - R(52) - R(53) - R(54) - R(81) - R(140) - R(141) \\ &\quad - R(142) - R(143) + R(21) + R(71) + R(79) + R(87) + R(91) \\ &\quad + R(137) \\ \frac{d[CH^+]}{dt} &= -R(60) - R(65) - R(82) - R(147) - R(148) - R(149) + R(22) \\ &\quad + R(34) + R(104) + R(110) \\ \frac{d[C^+]}{dt} &= -R(64) - R(83) - R(84) + R(23) + R(148) \\ \frac{d[OH^+]}{dt} &= -R(41) - R(67) - R(68) - R(105) - R(106) - R(107) - R(108) \\ &\quad - R(109) - R(110) + R(24) + R(72) + R(89) + R(112) + R(116) \\ \frac{d[NH_2^+]}{dt} &= -R(48) - R(74) - R(125) - R(126) - R(127) - R(128) - R(129) \\ &\quad + R(28) + R(131) + R(132) + R(134) \\ \frac{d[NH^+]}{dt} &= -R(49) - R(75) - R(76) - R(130) - R(131) - R(132) + R(29) \\ &\quad + R(113) + R(133) \\ \frac{d[CH_3^+]}{dt} &= -R(55) - R(56) - R(57) - R(144) - R(145) + R(32) + R(95) \\ &\quad + R(102) + R(115) + R(117) + R(118) + R(135) + R(146) \\ \frac{d[CH_2^+]}{dt} &= -R(58) - R(59) - R(146) + R(33) + R(96) + R(103) + R(147) \\ \frac{d[H_3O^+]}{dt} &= -R(36) - R(37) - R(38) - R(93) - R(94) - R(95) - R(96) + R(97) \\ &\quad + R(98) + R(101) + R(105) + R(109) + R(111) + R(125) + R(130) \\ &\quad + R(136) + R(139) + R(140) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[NH_4^+]}{dt} = & -R(43) - R(44) + R(93) + R(99) + R(108) + R(119) + R(120) \\ & + R(121) + R(122) + R(123) + R(124) + R(127) + R(138) \\ & + R(142) + R(144) + R(149) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[CH_5^+]}{dt} = & -R(50) - R(136) - R(137) - R(138) - R(139) + R(114) + R(141) \\ & + R(143) + R(145) \end{aligned}$$

DANKSAGUNG

Dem Direktorium des Max-Planck-Instituts danke ich für die Möglichkeit, daß diese Arbeit in der Abteilung Kosmophysik durchgeführt werden konnte.

Herrn Prof. Dr. H. Fechtig danke ich für die Übernahme des Referats und Herrn Prof. Dr. K. O. Münnich für die Übernahme des Koreferats dieser Arbeit.

Besonderer Dank gilt dem Leiter meiner Arbeitsgruppe Dr. D. Krankowsky und Herrn Dr. P. Lämmerzahl für die Unterstützung, ihr Interesse an dieser Arbeit und das angenehme Arbeitsklima in ihrer Gruppe.

Herrn B. Anweiler danke ich für die Hilfe bei der Arbeit am Großrechner und für seine Hilfe bei der Erstellung der Abbildungen. Herrn Dr. U. Stubbemann sei für seine Hilfsbereitschaft und für viele fruchtbare Diskussionen gedankt.

Herrn Dr. S. Kreisz danke ich für seine Diskussionsbereitschaft bei „chemischen“ Problemen und für die Durchsicht des Manuskripts.

LEBENS LAUF

- 21.10.1953 Als dritter Sohn der Ehegatten Egon Woweries und Anneliese Woweries in Heidelberg geboren.
- 1.04.1960 Besuch der Grundschule in Eppelheim (Kreis Heidelberg).
- 1.04.1964 Eintritt in die Realschule Heidelberg.
- 10.12.1964 Umzug nach Pforzheim und Besuch der Realschule Pforzheim.
- 1.06.1970 Erwerb der Mittleren Reife und Aufnahme am Technischen Gymnasium Pforzheim.
- 27.07.1973 Erwerb der fachgebundenen Hochschulreife.
- 2.08.1973 Einberufung zum Wehrdienst.
- 1.10.1974 Nach Ableistung der 15 monatigen Wehrpflicht aus der Bundeswehr entlassen.
- SS75-WS78 Studium an der Pädagogischen Hochschule Karlsruhe.
Belegte Fächer: Musikerziehung und Mathematik.
- 1.04.1979 Studium der Physik und Astronomie an der Universität Heidelberg.
- 28.08.1981 Ablegung der Diplom-Vorprüfung.
- 1.05.1983 Diplomarbeit am Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg, Abteilung Kosmophysik. Thema: Eichung eines Energie-Analysators zum Nachweis von Gasen und Ionen beim Vorbeiflug am Halley'schen Kometen. Gutachter: Prof. Dr. H. Fechtig, Prof. Dr. E. Jessberger.
- 30.04.1985 Ablegung der Diplomprüfung in Physik. Nebenfach: Astronomie.
- 1.06.1985 Anstellung als wiss. Hilfskraft am Max-Planck-Institut für Kernphysik Heidelberg in der Arbeitsgruppe von Dr. D. Krankowsky. Mitarbeit beim Projekt GIOTTO .