

Wie sieht es im Inneren von Planeten aus?

Ab-initio-Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen

R. Redmer, M. French, M. Bethkenhagen, M. Schöttler, M. Preisig, B. Witte, M. Schörner, C. Kellermann,
Institut für Physik, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die Drücke und Temperaturen im Inneren von solaren und extrasolaren Planeten sind extrem hoch. Weite Bereiche sind daher noch nicht durch Experimente zugänglich und können nur mit Hilfe von theoretischen Methoden untersucht werden.
- Wir verwenden DFT-MD Simulationen, um Materie unter extremen Bedingungen im Hinblick auf ihre strukturellen, thermodynamischen und Transporteigenschaften zu studieren.
- Mit neuartigen Röntgen-Thomson-Streuexperimenten kann der dynamische Strukturfaktor von Materie unter extremen Bedingungen gemessen werden. Seine theoretische Analyse erlaubt ebenso wertvolle Rückschlüsse auf das Verhalten solcher Materie im Inneren von Planeten.

Der innere Aufbau von solaren und extrasolaren Planeten ist von großem Interesse für die Astrophysik. Mit Experimenten können die relevanten Drücke (Mbar - Gbar) und Temperaturen (1.000 K - 100.000 K) nur zum Teil untersucht werden. Deswegen muss auf Datensätze aus theoretischen Rechnungen zurückgegriffen werden, sodass das Innere von Planeten bis hin zu Braunen Zwergen und deren Eigenschaften über passende Modelle beschrieben werden kann [1].

Quantenmechanische Rechnungen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) für das Elektronensystem werden mit Molekulardynamik-Simulationen (MD) für die Ionen kombiniert (DFT-MD), um die mikroskopische Physik dieser extremen Zustände zu verstehen. Hierbei wird auf den Ebene-Wellen-Code VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) zurückgegriffen, der sich als effizientes Werkzeug für diese Untersuchungen erwiesen hat. Wir verwenden neben dem weit verbreiteten Dichtefunktional von Perdew, Burke und Ernzerhof (PBE) auch Hybrid-Funktionale (HSE) und Funktionale mit nichtlokalen van-der-Waals (vdW) Wechselwirkungen, um verlässlichere Ergebnisse für Materie unter extremen Bedingungen zu erhalten. Starke Elektronenkorrelationen, wie sie in den teilweise gefüllten Schalen von Nebengruppenmetallen zu finden sind, werden

durch das Hubbard-Modell in der DFT (DFT+U) berücksichtigt. Dafür wird der DFT-Code Quantum Espresso verwendet. Dies führt zu einer besseren Beschreibung des elektronischen Grundzustands, z.B. für Eisen. Die Entropie kann in vielen Fällen nicht direkt aus der DFT-MD bestimmt werden und muss mit aufwendigen numerischen Methoden, z.B. thermodynamischer Integration, bestimmt werden. Ziel ist dabei unter anderem die Konstruktion von thermodynamischen Potentialen für Materie unter extremen Bedingungen.

Der Fokus der Arbeiten liegt auf verschiedenen Stoffen: (a) Wasserstoff und Helium für Planeten wie Jupiter und Saturn, (b) Wasser und komplexe Gemische mit Ammoniak und Methan als molekulare Komponenten für Uranus, Neptun und allgemein neptunartige Exoplaneten (siehe Abb. 1 [2]), und (c) Minerale wie Magnesium- und Eisenoxid sowie Eisen als Bausteine der Mäntel und Kerne von Gesteinsplaneten. Neben den einzelnen Komponenten werden ebenfalls deren Mischungen untersucht, um verbesserte Modelle für Zustandsgleichung und Transporteigenschaften zu erhalten, siehe [3].

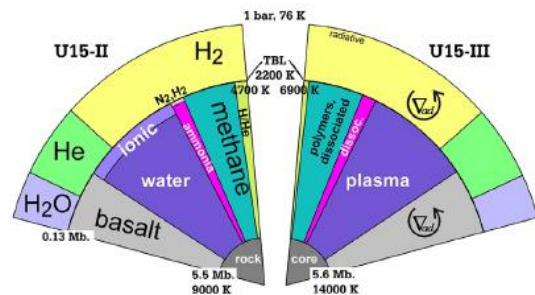


Abbildung 1: Drei-Schichten-Modelle von Uranus mit zwei verschiedenen thermischen Grenzschichten [2]. Die Zustandsgleichungen und die physikalischen Eigenschaften der verschiedenen Stoffe sind für den gegebenen Temperatur- und Dichtebereich für die Modellierung des Planeten notwendig.

Wasserstoff als häufigstes Element des Universums wurde bereits intensiv in der AG untersucht. Trotzdem ist die genaue Lage des Nichtmetall-Metall-Übergangs weiter offen. Die Vorhersage der Koexistenzkurve unter Berücksichtigung der nichtlokalen vdW-Beiträge [4] soll zu höheren Temperaturen hin ($T > 2000$ K) erweitert werden. Die zusätzlich berechnete elektrische Leitfähigkeit und das Reflexionsvermögen sollen Aufschluss über die elektronischen Eigenschaften geben und ermöglichen den Vergleich mit Experimenten.

Ein besonderer Schwerpunkt des Projekts liegt

nicht nur auf der Bestimmung der Zustandsgleichung einzelner Komponenten, sondern auch auf der systematischen Bestimmung der thermophysikalischen Eigenschaften von Wasserstoff-Helium-Mischungen. Es wurde bisher vorhergesagt, dass bei hohen Drücken eine Entmischung in die einzelnen Komponenten erfolgt, was z.B. für das Innere von Saturn relevant wäre. Genauere Vorhersagen können durch die direkte Berechnung der realen Mischungsentropie getroffen werden, die durch thermodynamische Integration gewonnen werden kann. Durch die Berechnung von Eigenschaften wie Wärmekapazität, Kompressibilität, elektrische und thermische Leitfähigkeit, Scherviskosität und Opazität können außerdem präzisere Modelle von planetaren Dynamos erstellt werden.

Ein Vergleich der theoretischen Daten mit vorhandenen Experimenten ist unabdingbar, um die Qualität der Ergebnisse zu bewerten. Sowohl Stoßwellen- als auch Diamantstempelzellenexperimente ermöglichen einen Vergleich. Die DFT-MD-Daten zeigen dabei in der Regel eine sehr gute Übereinstimmung.

Die Analyse von molekularen Systemen wie Wasser und Ammoniak und deren Mischung ist notwendig, um ein besseres Verständnis des Aufbaus und der Entwicklung von Planeten wie Uranus und Neptun zu erhalten. Insbesondere die superionische Phase, die nicht nur in den einzelnen Komponenten sondern auch in Wasser-Ammoniak-Mischungen bei hohen Drücken vorhergesagt wird, hat einen großen Einfluss auf die Transporteigenschaften in solchen Planeten und damit auf deren Dynamoregion, siehe Abb. 2 [5].

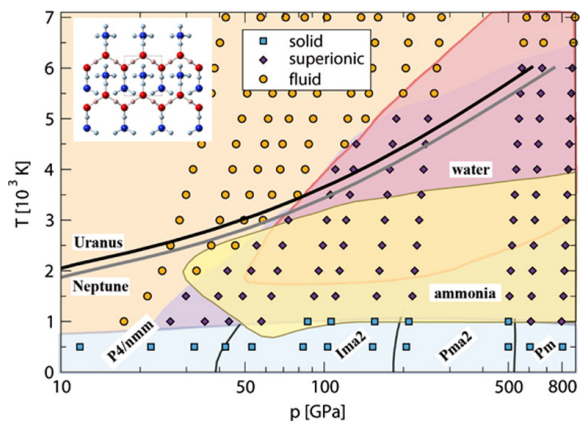


Abbildung 2: Phasendiagramm der 1:1 Wasser-Ammoniak-Mischung [5]. Die Symbole kennzeichnen die jeweiligen Phasen der Mischung. Die schwarze und graue Linie stellen die Isentropen durch Uranus und Neptun dar.

Im Hinblick auf erdähnliche Planeten, z.B. Supererden (extrasolare Planeten mit bis zu 10 Erdmassen) sind Gesteine, Metalle und Metalloxide wie Magnesium- und Eisenoxid von großer Bedeutung. Neben den strukturellen Änderungen spielen eben-

so magnetische Phasenübergänge eine wichtige Rolle in Eisenoxid und in reinem Eisen, welche wiederum Zustandsgleichung und Leitfähigkeiten beeinflussen. Insbesondere für die Bedingungen an der Grenze zwischen dem inneren und äußeren (Eisen-) Kern der Erde liefern aktuelle Experimente unterschiedliche Ergebnisse für die thermische Leitfähigkeit. DFT-MD-Simulationen sollen in diesem Bereich durchgeführt werden und zur Klärung der experimentellen Diskrepanzen beitragen.

Darüber hinaus wird der dynamische Strukturfaktor für Röntgen-Thomson-Streuexperimente mit Beryllium und Aluminium berechnet und mit den Daten verglichen. Zur präziseren Vorbereitung von Experimenten soll aus dem dynamischen Strukturfaktor von Beryllium das Plasmonen-Signal bestimmt werden, das z.B. Aufschluss über die Schallgeschwindigkeit in diesen Materialien unter extremen Bedingungen geben kann. Insbesondere soll der Einfluss verschiedener Austausch-Korrelationsfunktionale auf die Ergebnisse untersucht werden. Weiterhin liefert auch die Berechnung des statischen Strukturfaktors wertvolle Hinweise auf das Materialverhalten, z.B. bei lasergetriebenen Schmelzexperimenten mit Kupfer oder Gold.

WWW

<http://www.physik.uni-rostock.de>

Weitere Informationen

- [1] W. Lorenzen, A. Becker, R. Redmer, *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter*, editiert von M. Desjarlais, F. Graziani, R. Redmer und S. Tricky (Springer, Berlin 2014).
- [2] N. Nettelmann, K. Wang, J.J. Fortney, S. Hamel, S. Yellamilli, M. Bethkenhagen und R. Redmer, *Icarus* **275**, 107 (2016).
- [3] M. French, A. Becker, W. Lorenzen, N. Nettelmann, M. Bethkenhagen, J. Wicht und R. Redmer, *Astrophysical Journal Supplement Series* **202**, 5 (2012).
- [4] M.D. Knudson, M.P. Desjarlais, A. Becker, R.W. Lemke, K.R. Cochrane, M.E. Savage, D.E. Bliss, T.R. Mattsson und R. Redmer, *Science* **348**, 1455 (2015).
- [5] M. Bethkenhagen, D. Cebulla, R. Redmer und S. Hamel, *Journal of Physical Chemistry A* **119**, 10582 (2015).

Förderung

DFG-FOR 2440/1 *Matter Under Planetary Interior Conditions*, DFG-SPP 1992 *The Diversity of Extrasolar Planets*