

# Ein Blick ins Innere von Planeten

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

R. Redmer, M. French, M. Bethkenhagen, M. Preising, M. Schörner, A. Bergemann, U. Kleinschmidt, A. Roy,  
 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 wertvolle Rückschlüsse auf das Verhalten von Materie im Inneren von Planeten.

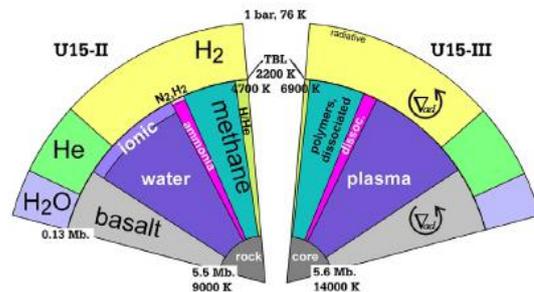
Der innere Aufbau von solaren und extrasolaren Planeten ist von großem Interesse für die Astrophysik. Mit Experimenten können die relevanten Drücke (Mbar - Gbar) und Temperaturen (1000 K - 100 000 K) nur zum Teil untersucht werden. Deswegen muss auf Datensätze aus theoretischen Rechnungen zurückgegriffen werden, sodass das Innere von Planeten bis hin zu Braunen Zwergen und deren Eigenschaften über passende Modelle beschrieben werden kann.

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 Austausch-Korrelations (XC)-Funktional von Perdew, Burke und Ernzerhof (PBE) auch nichtlokale Funktionale wie das HSE-Hybridfunktional und van-der-Waals-Funktionale, um verlässlichere Ergebnisse für Materie unter extremen Bedingungen zu erhalten.

Neben den thermodynamischen Eigenschaften berechnen wir Transporteigenschaften wie elektrische Leitfähigkeit, Wärmeleitfähigkeit, die Viskosität

sowie Diffusionskoeffizienten. Auch optische Eigenschaften wie dielektrische Funktion, Absorptionskoeffizient und Reflektivität sind für einige Anwendungen von Interesse. Die Entropie ist in vielen Fällen nicht direkt aus der DFT-MD zugänglich und muss mit aufwendigen numerischen Methoden, z.B. thermodynamischer Integration, bestimmt werden. Ziel ist dabei unter anderem die Bestimmung von Phasenübergängen und Entmischungsregionen in Materie unter extremen Bedingungen.

Der Fokus unserer 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 (siehe Abb. 1 [2]), Neptun und allgemein neptunartige Exoplaneten, 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.



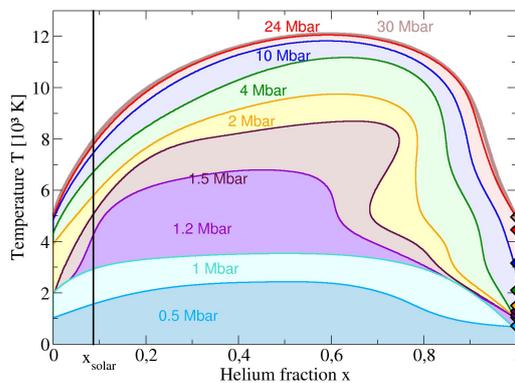
**Abbildung 1:** Drei-Schichten-Modelle von Uranus mit zwei verschiedenen thermischen Grenzschichten [1]. Die Zustandsgleichungen und die physikalischen Eigenschaften der verschiedenen Stoffe sind für den gegebenen Temperatur- und Dichtebereich für die Modellierung des Planeten notwendig.

Ein Vergleich der DFT-MD-Ergebnisse experimentellen Daten ist unabdingbar, um die Qualität unserer Ergebnisse zu bewerten. Die DFT-MD-Daten zeigen dabei in der Regel eine sehr gute Übereinstimmung Ergebnissen aus Hochdruckexperimenten.

Wasserstoff als häufigstes Element des Universums wird seit langem in der AG intensiv untersucht. Unsere aktuellen Arbeiten beschäftigen sich z.B. mit der Vorhersage der genauen Lage des Nichtmetall-Metall-Übergangs sowie mit Möglichkeiten, den Einfluss von Elektron-Elektron-Streuprozessen bei Leitungsphänomenen korrekt mit der DFT-MD-Methode zu erfassen [2]. Die berechnete elektrische Leitfähigkeit und das damit zusammenhängende Reflexionsvermögen geben dabei Aufschluss über die Ände-

nung der elektronischen Struktur des Wasserstoffs mit Dichte und Temperatur. Ebenso ermöglichen diese physikalischen Größen einen unmittelbaren Vergleich mit Experimenten.

Ein weiterer Schwerpunkt des Projekts liegt auf der systematischen Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Mischungen aus Wasserstoff und Helium. Es wurde schon lange vermutet, dass bei hohen Drücken eine Entmischung in die einzelnen Komponenten erfolgt, was besonders für das Innere von Saturn große Bedeutung hätte. Genaue Vorhersagen des Entmischungsgebietes, siehe Abb. 2, können mithilfe der direkten Berechnung der realen Mischungsentropie getroffen werden. Weiterhin können durch Berechnung von Transporteigenschaften wie der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit, Scherviskosität und Opazität realistische Modelle planetarer Dynamos von Jupiter und Saturn entwickelt werden.



**Abbildung 2:** Berechnetes Entmischungsdiagramm von Wasserstoff und Helium unter hohen Drücken [3]. Unterhalb der farbigen Linien entmischen beide Substanzen.

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 [4]. Superionische Phasen, die sowohl bei den einzelnen Komponenten als auch in Wasser-Ammoniak-Mischungen bei hohen Drücken vorhergesagt werden, können einen großen Einfluss auf die innere Struktur und thermische Entwicklung solcher Planeten haben.

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 in diesen Materialien auch magnetische Phasenübergänge eine wichtige Rolle, welche wiederum Zustandsgleichung und Leitfähigkeiten beeinflussen, wie z.B. in reinem Eisen oder in Eisenoxid. Zum Beispiel er-

geben verschiedene aktuelle Experimente sehr unterschiedliche Ergebnisse für die Wärmeleitfähigkeit an der Grenze zwischen dem inneren und äußeren (Eisen-) Kern der Erde. DFT-MD-Simulationen liefern hierbei zur Klärung dieser experimentellen Diskrepanzen entscheidende Beiträge [5].

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 elektronischen Strukturfaktor das Plasmonen-Signal bestimmt werden. Der dynamische Strukturfaktor der Ionen kann Aufschluss über die Schallgeschwindigkeit in diesen Materialien unter extremen Bedingungen geben. 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 ultraschnellen lasergetriebenen Schmelzexperimenten mit Kupfer oder Gold.

**WWW**

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

**Weitere Informationen**

- [1] N. Nettelmann, K. Wang, J. J. Fortney, S. Hamel, S. Yellamilli, M. Bethkenhagen und R. Redmer, *Icarus* **275**, 107 (2016). doi: 10.1016/j.icarus.2016.04.008
- [2] M. French, G. Röpke, M. Schörner, M. Bethkenhagen, M. P. Desjarlais und R. Redmer, *Physical Review E* **105**, 065204 (2022). doi: 10.1103/PhysRevE.105.065204
- [3] M. Schöttler und R. Redmer, *Physical Review Letters* **120**, 115703 (2018). doi:10.1103/PhysRevLett.120.115703
- [4] M. Bethkenhagen, E. R. Meyer, S. Hamel, N. Nettelmann, M. French, L. Scheibe, C. Ticknor, L. A. Collins, J. D. Kress, J. J. Fortney und R. Redmer, *Astrophysical Journal* **848**, 67 (2017). doi:10.3847/1538-4357/aa8b14
- [5] J.-A. Korell, M. French, G. Steinle-Neumann und R. Redmer, *Physical Review Letters* **122**, 086601 (2019). doi:10.1103/PhysRevLett.122.086601

**Förderung**

DFG-FOR 2440/2 *Matter Under Planetary Interior Conditions*, DFG-SPP 1992 *The Diversity of Extrasolar Planets*

**DFG Fachgebiet**

307-02, 310-01