

Ein Blick ins Innere von Planeten und Sternen

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

R. Redmer, M. Preising, M. Bethkenhagen, M. Meshhal, A. Bergermann, A. Roy, U. Klein-schmidt, K. Abraham,
 Institut für Physik, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die Drücke und Temperaturen im Inneren von Planeten und Sternen sind extrem hoch. Daher sind weite Bereiche noch nicht durch Experimente zugänglich.
- Wir verwenden DFT-MD Simulationen, um Materie unter extremen Bedingungen im Hinblick auf ihre strukturellen, thermodynamischen und Transporteigenschaften zu studieren.
- Wir analysieren Röntgen-Thomson-Streuexperimente, was wertvolle Rückschlüsse auf das Verhalten von Materie im Inneren von Planeten und Sternen erlaubt.

Der innere Aufbau von solaren und extrasolaren Planeten ist von großem Interesse für die Astrophysik. Kernfusion erzeugt Bedingungen wie im Inneren von Sternen, bei denen Drücke und Temperaturen nochmals höher sind als in Planeten. Mit Experimenten können die relevanten Drücke (Mbar - Gbar) und Temperaturen (1000 K - 10 000 000 K) nur zum Teil untersucht werden. Deswegen muss auf Datensätze aus theoretischen Rechnungen zurückgegriffen werden, sodass das Innere von Planeten bis hin zu Sternen 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, das meta-GGA SCAN sowie van-der-Waals-Funktionale, um verlässlichere Ergebnisse für Materie unter extremen Bedingungen zu erhalten.

Einige physikalische Größen erfordern Rechnungen mit großen Teilchenzahlen. Für den Fall,

dass der Rechenaufwand für diese Teilchenzahlen mit DFT-MD zu groß ist, benutzen wir neuronale Behler-Parrinello-Netzwerke, die diese Berechnungen durchführen können.

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 [1] sowie Sterne bzw. Kernfusion, (b) Wasser und komplexe Gemische mit Ammoniak und Methan als molekulare Komponenten für neptunartige Planeten [2], und (c) Minerale wie Eisen und Eisenverbindungen als Bausteine der Mäntel und Kerne von Gesteinsplaneten. Neben den einzelnen Komponenten werden ebenfalls deren Mischungen untersucht.

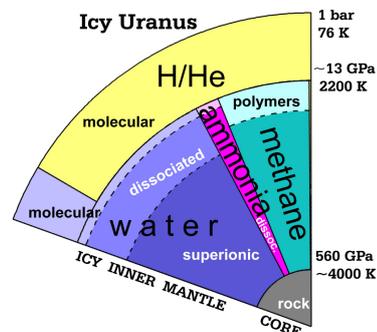


Abbildung 1: Drei-Schichten-Modell von Uranus [3]. Die Zustandsgleichungen und die physikalischen Eigenschaften der verschiedenen Stoffe sind für den gegebenen Temperatur- und Dichtebereich für die Modellierung des Planeten notwendig.

Ein Vergleich der DFT-MD-Ergebnisse mit experimentellen Daten ist unabdingbar, um die Qualität unserer Ergebnisse zu bewerten. Die DFT-MD-Daten zeigen dabei in der Regel eine sehr gute Übereinstimmung mit 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 (siehe Abb. 2 [4]). Die berechnete elektrische Leitfähigkeit und das damit zusammenhängende Reflexionsvermögen geben dabei Aufschluss über die Änderung 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 sowie anderen molekularen Mischungen. Es wurde schon lange vermutet, dass bei hohen Drücken eine Entmischung in die einzelnen Komponenten erfolgt. Genaue Vorhersagen des Entmischungsgebietes können mithilfe der direkten Berechnung der realen Mischungsentropie getroffen werden. Dadurch können genauere Planetenmodelle erstellt werden.

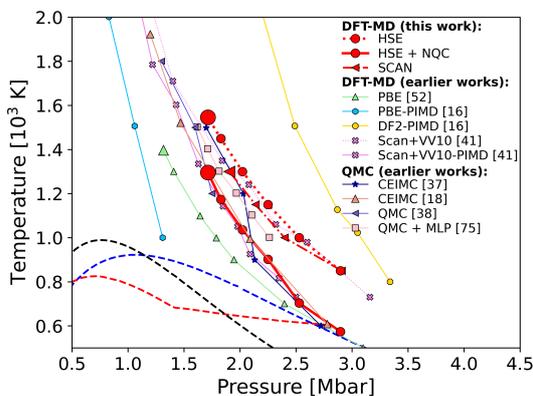


Abbildung 2: Phasendiagramm von Wasserstoff im Bereich der Metallisierung [4]. Durch die Verwendung des HSE-Funktional konnten die Metallisierungsbedingungen in bisher unerreichter Qualität vorhergesagt werden.

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 [2]. 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. Zum Beispiel ergeben 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 Aluminium und Eisen berechnet und mit den Daten verglichen. Zur präziseren Vorbereitung von Experimenten soll aus dem dynamischen elektronischen Strukturfaktor das Plasmonen-Signal bestimmt werden. 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] M. Preising, M. French, C. Mankovich, F. Soubiran und R. Redmer, *The Astrophysical Journal Supplemental Series* **269**, 47 (2023). doi: 10.3847/1538-4365/ad0293
- [2] A.J. Roy, A. Bergermann, M. Bethkenhagen und R. Redmer, *Physical Chemistry Chemical Physics* **26**, 14374 (2024). doi: 10.1039/D4CP00058G
- [3] 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, *The Astrophysical Journal* **848**, 1 (2018). doi:10.3847/1538-4357/aa8b14
- [4] A. Bergermann, L. Kleindienst, and R. Redmer, *The Journal of Chemical Physics* **161**, 234303 (2024). doi:10.1063/5.0241111
- [5] U. Kleinschmidt, M. French, G. Steinle-Neumann und R. Redmer, *Physical Review B* **107**, 085145 (2023). doi:10.1103/PhysRevB.107.085145

Förderung

DFG-SPP *The Dynamics of Deep Earth*, DFG-SPP 1992 *The Diversity of Extrasolar Planets*, DFG RE 882/24-1

DFG Fachgebiet

307-02, 310-01