

Materie unter extremen Bedingungen: Strukturmodelle, Zustandsgleichungen und Materialeigenschaften für das Innere von Großen Planeten und Braunen Zwergen

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Rostock

vorgelegt von

Andreas Becker

geboren am 10.01.1985 in Halberstadt
aus Rostock

Rostock, 24. April 2015

Eingereicht: Rostock, 24. April 2015

Verteidigung: Rostock, 29. Juli 2015

Gutachter: Prof. Dr. Ronald Redmer

Institut für Physik
Universität Rostock

Prof. Dr. Tilman Spohn

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)
Institut für Planetenforschung, Berlin

Prof. Dr. Ralph Neuhäuser

Astrophysikalisches Institut und Universitäts-Sternwarte
Universität Jena

Für meine Familie

Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit werden Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium präsentiert, welche einen Dichtebereich von 10^{-10} g/cm³ bis 2000 g/cm³ und einen Temperaturbereich von 60 K bis 10 Millionen K abdecken. Das Herzstück dieser Zustandsgleichungen bilden Molekulardynamiksimulationen basierend auf der Dichtefunktionaltheorie bei endlichen Temperaturen (DFT-MD), welche den stark korrelierten Bereich der warmen dichten Materie sehr gut beschreiben können. Die notwendigen Erweiterungen der DFT-MD-Daten in die Bereiche des vollständig ionisierten Plasmas und des idealen Gases werden ebenfalls erläutert. Die Güte dieser Zustandsgleichungen wird durch Vergleiche mit Daten aus Hochdruckexperimenten unterlegt. Zusätzlich werden Strukturmodelle für Jupiter und Braune Zwerge sowie Masse-Radius-Relationen für Objekte mit bis zu 75-facher Jupitermasse vorgestellt, welche auf den genannten Zustandsgleichungen basieren. Diese Modelle reproduzieren die bezüglich des Gravitationsfeldes relevanten und durch Beobachtungen gewonnenen Daten der Objekte. Abschließend werden für das adiabatische Innere von Großen Planeten und Braunen Zwergen Materialeigenschaften präsentiert, welche konsistent aus den Zustandsgleichungen resultieren oder mit Hilfe von zusätzlichen DFT-MD-Simulationen berechnet wurden. Solche Materialeigenschaften sind zum Beispiel die Wärmekapazitäten bei konstantem Druck oder Volumen, die isotherme Kompressibilität, die Schallgeschwindigkeit, die elektrische und thermische Leitfähigkeit, sowie die Scherviskosität und das Rosseland-Mittel der Opazität. Sowohl die Zustandsgleichungen als auch die Materialeigenschaften vertiefen unser Verständnis von Materie unter extremen Bedingungen im Inneren von Großen Planeten und Braunen Zwergen und dienen gleichzeitig als Ausgangsdaten für aufwändige magneto-hydrodynamische Simulationen, welche die Magnetfelder dieser Objekte untersuchen.

Abstract

The work in hand presents the construction of equations of state (EOS) for hydrogen and helium covering a wide range of densities from 10^{-10} g/cm³ to 2000 g/cm³ and temperatures from 60 K to 10 million K. They include an extended set of *ab initio* EOS data derived from finite-temperature density-functional theory molecular dynamics simulations (DFT-MD) for the strongly correlated quantum regime. Accurate connections to data derived from other approaches for the neighboring regions such as the ionized plasma and the ideal gas are presented. The reliability of these EOS data is demonstrated via comparisons with data derived from high-pressure experiments. Furthermore, interior structure models for Jupiter and Brown Dwarfs as well as mass-radius relations for objects with a mass of up to 75 Jupiters based on the current EOS data are introduced. These models fulfill all observational constraints for the gravity data. Finally, we present material properties for the adiabatic interiors of Giant Planets and Brown Dwarfs such as the heat capacities at constant pressure or constant volume, the isothermal compressibility, the speed of sound, the electrical and thermal conductivity as well as the shear viscosity and the Rosseland mean opacity. These material properties are derived in a consistent way either via differentiation of the discussed EOS data or from additional extensive DFT-MD simulations. In conclusion, the EOS data as well as the material properties deepen our knowledge and understanding of matter under extreme conditions in the interiors of Giant Planets and Brown Dwarfs and serve simultaneously as input data for extensive magneto-hydrodynamic simulations which investigate the magnetic field of such objects.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium	9
2.1. Dichtefunktionaltheorie-Molekulardynamik Simulationen (DFT-MD)	10
2.1.1. Dichtefunktionaltheorie und Kohn-Sham-Formalismus . . .	10
2.1.2. Umsetzung der DFT-MD in VASP	14
2.2. Zustandsgleichung von Wasserstoff (H-REOS.3)	17
2.2.1. DFT-MD-Daten	18
2.2.2. Anschluss zu niedrigen Dichten	22
2.2.3. Anschluss zu sehr hohen Dichten	25
2.3. Zustandsgleichung von Helium (He-REOS.3)	28
2.3.1. DFT-MD-Daten	28
2.3.2. Anschluss zu niedrigen Dichten	30
2.4. Thermodynamische Konsistenz	37
2.5. Zustandsgleichung einer linearen Mischung	39
2.6. Zusammenfassung von Kapitel 2	43
3. Hochdruckexperimente	45
3.1. Statische Diamantstempelzellen	45
3.2. Hugoniotexperimente	48
3.3. Quasi-isentrope Kompressionsexperimente	55
3.4. Experimente mit Thomson-Streuung	61
3.4.1. Ionisationsgrad entlang der Hugoniotkurve von Deuterium	64
3.4.2. Thomsonstreuung an dissoziierendem Wasserstoff	66
3.5. Der Nichtmetall-Metall Übergang in Wasserstoff	69
3.6. Zusammenfassung von Kapitel 3	75

4. Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen für GPs und BDs	79
4.1. Modellierung Großer Planeten (GPs): Das Drei-Schichten Modell . . .	79
4.2. Modellierung Brauner Zwerge (BDs): Das Ein-Schicht Modell . . .	85
4.3. Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen	87
4.4. Zusammenfassung von Kapitel 4	93
5. Materialeigenschaften im Innern von GPs und BDs	95
5.1. Berechnung von thermodynamischen Materialeigenschaften	96
5.2. Berechnung von Transporteigenschaften	99
5.2.1. Scherviskosität	101
5.2.2. Elektrische und thermische Leitfähigkeit	103
5.2.3. Rosseland-Mittel der Opazität	109
5.3. Zusammenfassung von Kapitel 5	111
6. Zusammenfassung und Ausblick	113
A. Tabellen aus Kapitel 3	117
B. Tabellen aus Kapitel 5	121
Literaturverzeichnis	129
Eigene Publikationen	165

Abbildungsverzeichnis

1.1. Klassifikation von Planeten, Braunen Zwergen und Sternen	3
1.2. Exoplaneten	5
2.1. Formale Äquivalenz von DFT und N-Teilchen-Schrödingergleichung	12
2.2. Brillouin-Zone und Implementierung der DFT-MD in VASP	16
2.3. Wasserstoffphasendiagramm	19
2.4. Zusammensetzung der H-REOS.3	20
2.5. Paarverteilungsfunktion und Koordinationszahl	21
2.6. Partiiell ionisiertes Wasserstoffplasma	25
2.7. Hochdichtanschluss in der H-REOS.3	27
2.8. Zusammensetzung der He-REOS.3	29
2.9. Virialzustandsgleichung	33
2.10. Isothermen der He-REOS.3	35
2.11. Beispieltabellen für He-REOS.3	36
2.12. Thermodynamische Konsistenz	38
2.13. Lineare und reale Mischungszustandsgleichung	40
2.14. Entmischung von Wasserstoff und Helium	42
2.15. Entmischung in Exoplaneten	43
3.1. 300-K-Isothermen von Helium	45
3.2. 300-K-Isothermen von Wasserstoff	46
3.3. Hugoniotkurven von Wasserstoff	48
3.4. Hugoniotkurven von Helium	50
3.5. $\rho - P$ -Verlauf vorverdichteter Hugoniotkurven von Wasserstoff . .	51
3.6. $P - T$ -Verlauf vorverdichteter Hugoniotkurven von Wasserstoff . .	52
3.7. Multischock-Experimente an Wasserstoff	53
3.8. Quasi-isentrope Kompression von Deuterium - Coldcurve	56

3.9. Quasi-isentrope Kompression von gasförmigen Deuterium	57
3.10. Quasi-isentrope Kompression von Helium	59
3.11. Quasi-isentrope Experimente bei planetaren Bedingungen	61
3.12. Thomsonstreuung entlang der Deuterium-Hugoniotkurve	64
3.13. Thomsonstreuung an dissoziierendem Wasserstoff	68
3.14. Druckisothermen beim Phasenübergang	72
3.15. Paarverteilungsfunktionen beim Phasenübergang	73
3.16. Leitfähigkeiten beim Phasenübergang	74
3.17. Reflexionsvermögen beim Phasenübergang	74
4.1. Drei-Schicht-Modell für Große Planeten	80
4.2. Kernmassen und Metallizitäten von Jupiter	81
4.3. Innerer Aufbau von Jupiter	83
4.4. Ein-Schicht-Modell und Atmosphärenprofile Brauner Zwerge	86
4.5. Masse-Radius-Relationen Brauner Zwerge	89
4.6. Metallizität im Innern Brauner Zwerge	90
4.7. Strukturmodelle Brauner Zwerge	92
5.1. Wärmekapazitäten in Jupiter	97
5.2. Wärmekapazitäten in Braunen Zwergen	98
5.3. Schallgeschwindigkeit, isobarer Expansionskoeffizient und isotherme Kompressibilität	99
5.4. Dynamische Scherviskositäten in GPs und BDs	102
5.5. Kinematische Scherviskositäten in GPs und BDs	103
5.6. Elektrische und thermische Leitfähigkeit in GPs und BDs	106
5.7. Lorenzzahl und Rosseland-Mittel der Opazität in GPs und BDs	109

Tabellenverzeichnis

1.1. Übersicht der verwendeten Zustandsgleichungsmodelle	8
2.1. Virialkoeffizienten in der He-REOS.3	31
4.1. Beobachtungsdaten von KOI-889b, Corot-3b, Corot-15b und Gliese-229b	87
4.2. Thermodynamik im Zentrum von KOI-889b, Corot-3b, Corot-15b und Gliese-229b	94
A.1. Isentrope Kompression von Deuterium: Vergleich theoretischer Vorhersagen	118
A.2. Isentrope Kompression von Helium: Vergleich theoretischer Vorhersagen	119
B.1. Thermodynamische Materialeigenschaften in Gliese-229b	122
B.2. Transporteigenschaften in Gliese-229b	123
B.3. Thermodynamische Materialeigenschaften in KOI-889b	124
B.4. Transporteigenschaften in KOI-889b	125
B.5. Thermodynamische Materialeigenschaften in Corot-3b	126
B.6. Transporteigenschaften in Corot-3b	127

1. Einleitung

Wasserstoff und Helium sind die häufigsten Elemente im Universum. Die Kenntnis von deren Hochdruckverhalten und Zustandsgleichungen sind von fundamentalem Interesse für die Modellierung von Großen Planeten und Braunen Zwergen, sowie zur Beschreibung der Trägheitsfusion (engl. ICF: inertial confinement fusion).

Die aktuellen Hochdruck-Zustandsgleichungen können grob in zwei Klassen unterteilt werden: zum einen Modelle im chemischen Bild und zum anderen Modelle im physikalischen Bild. Modelle im chemischen Bild, decken in der Regel ein großes Gebiet in der Dichte-Temperatur- oder Temperatur-Druck-Ebene ab. Der große Vorteil dieser Modelle ist, dass sie Zustandsgleichungsdaten vom idealen Gas bis in den entarteten Bereich aus einer Formulierung der freien Energie generieren können. Die in der Modellierung Großer Planeten (GPs) und Brauner Zwerge (BDs) am weitesten verbreitete Zustandsgleichung ist die von Saumon *et al.*²⁸⁴ (SCvH-EOS). Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird das Wort Zustandsgleichung auch mit der Abkürzung EOS (engl.: equation of state) synonym verwendet. In der Formulierung dieser chemischen Modelle liegt aber ein immanentes Problem: Die Behandlung von Korrelationen zwischen den einzelnen Teilchensorten auf Basis effektiver Paarpotentiale und die Wahl eines adäquaten Referenzsystems. Diese Punkte sind besonders wichtig im stark korrelierten Bereich, in dem beispielsweise druckgetriebene Dissoziation und Ionisation in Wasserstoff simultan auftreten können. Eine klare Unterteilung in Moleküle, Atome und Ionen ist unter solchen Bedingungen nicht mehr möglich. Diese Zustände von Materie können in Hugoniotexperimenten erzeugt werden, siehe Kapitel 3. Für Wasserstoff wird hier eine maximale Kompression der Probe ϱ/ϱ_0 (mit der Anfangsdichte ϱ_0) von 4,25-4,5 in den Experimenten gemessen^{169;281}, während die SCvH-EOS einen wesentlich höheren Wert von 5,5 vorhersagt. Somit sind chemische Modelle in diesem stark korrelierten Bereich nicht sehr gut geeignet.

Auf der anderen Seite sind *ab initio*-Simulationen für Wasserstoff und Helium (siehe McMahon *et al.*²¹⁴ für einen ausführlichen Review-Artikel) in sehr guter Übereinstimmung mit den Experimenten, siehe ebenfalls Kapitel 3. Diese Simulationen müssen jedoch für jede einzelne Dichte-Temperatur-Konfiguration separat durchgeführt werden und sind wegen der numerischen Umsetzung nur in einen bestimmten $\rho - T$ -Bereich anwendbar. Die freie Energie kann nachträglich durch Interpolation und Integration der Ergebnisse solcher Simulationen berechnet werden^{45;216;229}. Sie bleibt aber auf diesen spezifischen Bereich der Daten beschränkt, sodass es zur Zeit keine *ab initio*-Methode gibt, welche Daten vom idealen Gas bis in den entarteten Bereich für beliebige Temperaturen generieren kann.

Deshalb ist eine wesentliche Aufgabe in der vorliegenden Dissertation, Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium zu konstruieren, welche einen großen $\rho - T$ -Bereich wie die chemischen Modelle abdecken, jedoch die Genauigkeit von *ab initio*-Rechnungen besitzen. Obwohl es schon einige *ab initio*-Zustandsgleichungen für Wasserstoff gibt^{45;142;226;317}, sind diese in der Regel für Anwendungen in der ICF entwickelt worden. Die in dieser Arbeit in Kapitel 2 eingeführten Zustandsgleichungen für Wasserstoff (H-REOS.3) und Helium (He-REOS.3) sind somit die ersten ihrer Art, die für den großen $\rho - T$ -Bereich der Großen Planeten und Braunen Zwerge konstruiert wurden. Die verschiedenen Zustandsgleichungsmodelle, die dabei genutzt wurden, sind mit den Abkürzungen, Referenzen und kurzen Beschreibungen in Tabelle 1.1 aufgelistet.

Im Zusammenspiel zwischen *ab initio*-Zustandsgleichungen und Planetenmodellierung sind die Hochdruckexperimente das wesentliche Bindeglied. Sie können zwischen den einzelnen EOS-Modellen entscheiden, was beim maximalen Kompressionsverhältnis von Wasserstoff schon beschrieben wurde. Durch die Entwicklung von Diamantstempelzellen, Gaskanonen, Sprengstoffexperimenten, Hochleistungslasern und magnetisch beschleunigter Platten (Z-Pinch) können immer größere Bereiche der Druck-Temperatur-Ebene experimentell untersucht werden, siehe Kapitel 3.

Für die Berechnung von Strukturmodellen und Masse-Radius-Relationen Großer Planeten und Brauner Zwerge werden die H-REOS.3 und He-REOS.3 in Kapitel 4 genutzt. Diese Modelle erlauben einen direkten Vergleich zwischen den verwendeten Zustandsgleichungen, aber auch einen Test der Zustandsgleichungen selbst,

da die Modelle sämtliche Beobachtungsdaten bezüglich des Gravitationsfeldes erfüllen müssen. Dabei gilt bei gleichen Evolutionsstadien, je schwerer ein Großer Planet oder Brauner Zwerg ist, desto größer ist die Dichte des Wasserstoff-Helium-Gemisches im Innern. Außerdem sind die zentralen Temperaturen höher, je näher das Objekt an seinem Mutterstern ist, siehe Abbildung 1.2. Somit sind Zustände der Materie aus einem großen Bereich der Dichte-Temperatur-Ebene in den verschiedenen Großen Planeten und Braunen Zwergen zu finden. Deshalb ist die Beobachtung und Modellierung von Braunen Zwergen, welche in dieser Arbeit von besonderem Interesse sind, ein Test der Zustandsgleichung nicht-idealer entarteter Materie³⁰⁰.

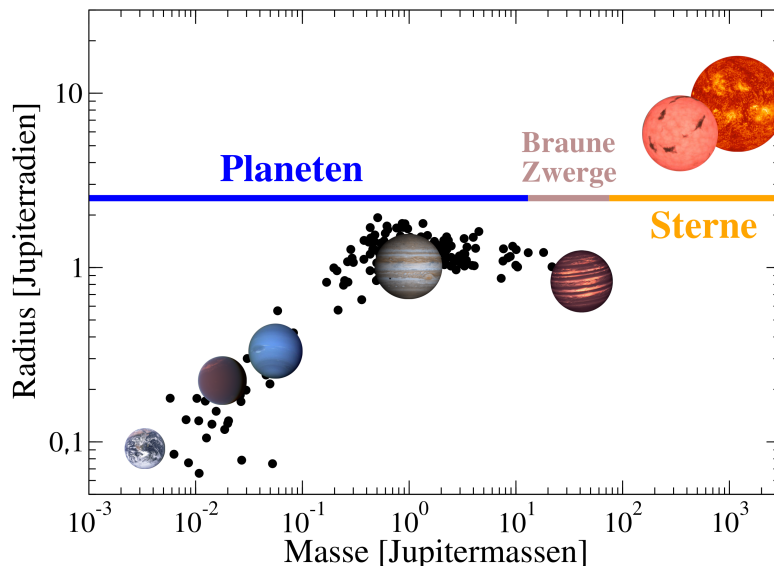


Abbildung 1.1.: Masse-Radius-Diagramm zur Klassifikation von Planeten, Braunen Zwergen und Sternen. Nicht maßstabsgerecht abgebildet sind die Planeten Erde, die Supererde GJ-1214b⁵⁸, Neptun, Jupiter, der Braune Zwerg Gliese-229b²³⁴, der M-Stern Gliese-229a und die Sonne.

Braune Zwerge sind weder Planeten noch Sterne. Sie entstehen wie Sterne durch den Kollaps einer kalten Gaswolke^{123;181}. Jedoch akkretieren sie bei diesem Prozess nicht genügend Materie um die kritische Masse zu erreichen, welche für die Wasserstofffusion im Zentrum nötig wäre. Diese Masse (engl. HBMM: hydrogen burning minimum mass) beträgt etwa 75 Jupitermassen^{20;181} (M_J). In der Entstehungsphase sind Braune Zwerge jedoch heiß und auch schwer genug um die Deute-

riumfusion im Zentrum zu ermöglichen^{16;43}. Hierzu genügt eine Masse von $13 M_J$, sodass das Intervall zwischen $13 M_J$ und $75 M_J$ eine semantische Abgrenzung der Braunen Zwerge zu den Planeten (keine Fusion) und Sternen (Wasserstofffusion) ist, siehe Abbildung 1.1. Die Entdeckung von massereichen extrasolaren Planeten mit $\sim 10 M_J$ und die theoretischen Vorhersagen, dass aus dem Kollaps einer Gaswolke Objekte bis zu $7 M_J$ entstehen können^{127;250} deuten jedoch auf einen überlappenden Übergang von Braunen Zwergen und den Planeten hin. Letztere entstehen jedoch in einer protoplanetaren Scheibe um einen Stern. Somit ist ein fundierteres Klassifikationskriterium als das Fusionkriterium für Braune Zwerge noch Gegenstand der aktuellen Debatte^{13;55}.

Im Jahr 1995 wurden neben dem ersten Exoplaneten um einen Hauptreihenstern 51 Pegasi-b²¹² auch die ersten Braunen Zwerge Gliese-229b²³⁴ und Teide-1²⁶³ entdeckt. Planeten um Pulsare wurden schon vorher detektiert³²⁶. Seither kamen ~ 1300 weitere Braune Zwerge¹ dazu. Erwähnenswert sind an dieser Stelle bedeutende Beobachtungen wie zum Beispiel ein Brauner Zwerg, der von seinem stellaren Begleiter in dessen Phase als Roter Riese geschluckt wurde und dies nach der Phase überlebt hat²⁰⁹ und Braune Zwerge, welche planetare Begleiter haben: 2MASS 1207-3932b²²³ und 2MASS J04414489+2301513³¹³. Stassun *et al.*²⁹⁸ ist es gelungen Masse, Radius und Temperatur eines Doppelsystems aus zwei sehr jungen Braunen Zwergen (wenige Millionen Jahre) im Orion Nebel zu vermessen. Da diese Objekte noch in der frühen Evolutionsphase der gravitativen Kontraktion sind, sind sie etwa halb so groß wie die Sonne. Im Gegensatz zu den Vorhersagen theoretischer Modelle ist der Braune Zwerg mit weniger Masse heißer als sein massereicherer Begleiter.

In Abbildung 1.2 sind (Exo-)Planeten und Braune Zwerge in Abhängigkeit von ihrer Masse und dem Abstand zum Mutterstern gezeigt. Die farbigen Punkte stehen, sofern die Daten bekannt sind, je für einen der heute ~ 1900 bekannten Exoplaneten². Der Farbcode steht für die Beobachtungsmethoden, die ausführlich im Buch von Seager²⁸⁸ vorgestellt werden. Während ein Transitplanet (rot) in Sichtlinie vor seinem Mutterstern vorbeizieht und damit dessen Helligkeit zeitweise absinkt (proportional zur Größe des verdunkelnden Planeten), schwanken diese charakteristischen Transit-Helligkeits-Kurven um einen Mittelwert, wenn mehrere Planeten im System sind (variable Transitzeiten).

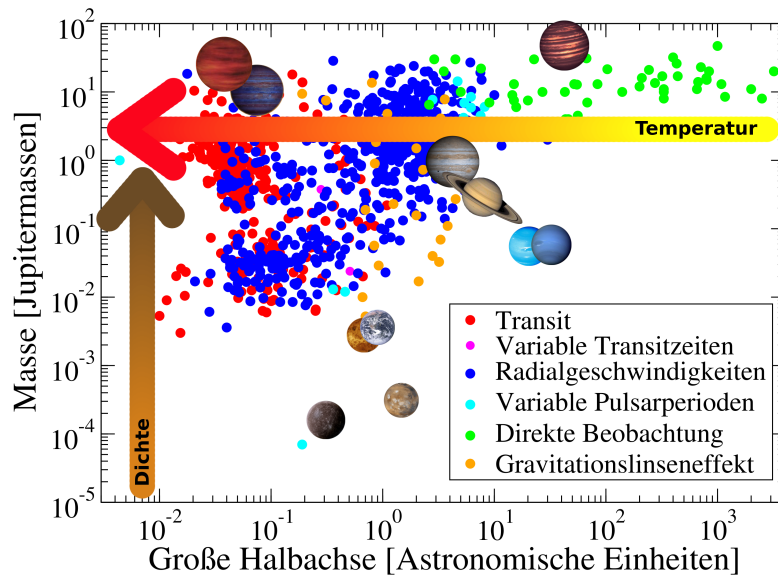


Abbildung 1.2.: Masse von Großen Planeten und Braunen Zwergen dargestellt über dem Abstand zum Mutterstern. Die farbigen Punkte repräsentieren Exoplaneten nach ihrer Entdeckungsmethode. Ebenfalls gezeigt sind die Planeten des Sonnensystems mit den in Kapitel 4 und 5 untersuchten massereichen Großen Planeten (KOI-889b mit $\sim 10M_J$) und Braunen Zwergen Corot-3b ($\sim 22M_J$) und Gliese-229b ($\sim 46M_J$).

Die ebenfalls sehr erfolgreiche Methode der Radialgeschwindigkeiten (blau) misst die Verschiebung der Spektrallinien des Muttersterns um ihren Laborwert. Sie wird durch die Präsenz eines planetaren Begleiters und der damit verbundenen gemeinsamen Bewegung um den Massenschwerpunkt des Systems verursacht. Diese Methode kann bei bekannter Inklination des Systems genau die Masse des Begleiters bestimmen, sodass man zusammen mit der Größe aus dem Transit die mittlere Dichte der Objekte berechnen kann. Die mittlere Dichte ist eine wesentliche Information, da man mit ihrer Hilfe grob die Zusammensetzung eines Planeten abschätzen kann^{289;306}. Weitere Methoden sind die gemessenen Pulsarperioden von wenigen Millisekunden, welche ebenfalls durch einen Begleiter gestört werden (cyan) und die direkte Beobachtung eines Planeten (grün), die möglich ist, wenn das System sehr jung ist oder der Orbit des Planeten eine sehr große Halbachse besitzt, das heißt der Planet sehr weit von seinem Stern entfernt ist. Außerdem kann der Gravitationslinseneffekt ausgenutzt werden, wenn das Licht eines Sterns

durch Vorbeiziehen eines Stern-Planeten-Systems in der Sichtlinie gebündelt wird und der Planet eine zusätzliche Vergrößerung verursacht. All diese Methoden sind auch geeignet, um Braune Zwerge zu entdecken.

Braune Zwerge sind sie aus vielen Aspekten sehr interessant, da sie abgesehen von der kurzen Phase der Deuteriumfusion und, wenn sie schwerer als $65 M_J$ sind, begleitet von einer noch kürzeren primordialen Lithiumfusion den Rest ihres Lebens nur noch abkühlen. Beispielsweise ist ihre Atmosphäre sehr komplex in verschiedenen Temperaturbereichen. So können sich unterhalb von 2300 K Staubkörner aus Silikaten und Eisen bilden^{164;205}, die dann unterhalb von 1300 K wieder verschwinden^{40;299} während bei noch niedrigeren Temperaturen Methanwolken entstehen¹⁶. Mehrschichtige Atmosphären mit Wolken so groß wie die Erde und Eisenregen wurden kürzlich auf den sonnennahen Braunen Zwergen Luhman-16a und Luhman-16b beobachtet^{9;39;63}. Die komplexe Physik der Atmosphären Brauner Zwerge ist jedoch nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit, sodass nur an der relevanten Stelle bei der Modellierung dieser Objekte im Kapitel 4.2 noch einmal kurz darauf eingegangen wird. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Modellierung des Innern von Braunen Zwergen. Wegen der anhaltenden Abkühlung kontrahieren BDs bis sie sogar kleiner sind als Jupiter, trotz der wesentlich größeren Masse. Dies liegt daran, dass im Innern Drücke von einigen 100 Gbar und Temperaturen von mehreren 100000 K entstehen, sodass die Materie hier vollständig entartet ist und diese Kompaktheit von Braunen Zwergen ermöglicht.

Zusammengefasst hat die vorliegende Arbeit deshalb folgenden Aufbau: In Kapitel 2 wird die Konstruktion der Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium vorgestellt, welche anschließend in Kapitel 3 mit den Ergebnissen verfügbarer Hochdruckexperimente verglichen werden und zur Auswertung aktueller Experimente dienen. Die lineare Mischung beider Zustandsgleichungen wird dann in Kapitel 4 benutzt, um Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen für Große Planeten (Jupiter) und insbesondere von Braunen Zwergen zu berechnen. Die Isentropen der Strukturmodelle sind dann Grundlage für thermodynamische Material- und Transporteigenschaften im Inneren von Großen Planeten und Braunen Zwergen, die dann in Kapitel 5 berechnet und vorgestellt werden. Eine Zusammenfassung dieser Arbeit und ein Ausblick auf noch ausstehende Probleme ist dann im abschließenden Kapitel 6 zu finden.

Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit, welche in Veröffentlichungen eingeflossen sind, sind durch die Abkürzungen A1-A10 hervorgehoben. Die entsprechenden Werke sind in der Liste der eigenen Publikationen im Anschluss an das Literaturverzeichnis zu finden.

1. Einleitung

Abkürzung	Ausgeschriebene Bezeichnung	Eigenschaften der EOS
DFT-MD ^{176–178}	Dichtefunktionaltheorie- Molekulardynamiksimulationen bei endlichen Temperaturen	<i>Ab initio</i> -Simulationen mit VASP, Korrelationen und Quanteneffekte sind konsistent in der DFT behandelt
H-REOS.1 ²⁴⁶	Wasserstoff-Rostock- Zustandsgleichung Version 1	EOS für Große Planeten, kombiniert FVT, FVT ⁺ und DFT-MD-Daten aus Simulationen mit 64 Teilchen
H-REOS.2 ^{243,[A10]}	Wasserstoff-Rostock- Zustandsgleichung Version 2	EOS für Große Planeten, kombiniert FVT, FVT ⁺ und DFT-MD-Daten aus Simulationen mit 256 Teilchen
H-REOS.3 ^{18,[A2]}	Wasserstoff-Rostock- Zustandsgleichung Version 3	EOS für Große Planeten und Braune Zwerge, kombiniert FVT/FVT ⁺ , CP, SCvH, PIMC und DFT-MD-Daten mit 256 Teilchen
He-REOS.1 ²⁴⁶	Helium-Rostock Zustandsgleichung Version 1	EOS für Große Planeten, kombiniert Sesame 5761 und DFT-MD-Daten für vier Isothermen aus 32/64-Teilchen-Simulationen
He-REOS.3 ^{18,[A2]}	Helium-Rostock Zustandsgleichung Version 3	EOS für Große Planeten und Braune Zwerge, kombiniert eine Virial-EOS, SCvH und DFT-MD-Daten mit 108 Teilchen
SCvH ²⁸⁴	Saumon, Chabrier und van Horn EOS für H und He	EOS für Große Planeten und Braune Zwerge im chemischen Bild, minimiert freie Energie, nutzt fluid perturbation theory
FVT ¹⁵⁸	Fluid variational theory Wasserstoff-EOS	EOS im chemischen Bild, minimiert freie Energie, nutzt fluid variational theory
FVT ⁺ ¹³⁹	Fluid variational theory „plus“-Wasserstoff-EOS	EOS im chemischen Bild basierend auf FVT, behandelt zusätzlich Ionisation
CP ⁵⁶	Chabrier-Potekhin-Modell für die Wasserstoff-EOS	Modell der freien Energie für vollständig ionisiertes Plasma
PIMC ¹⁴²	Pfadintegral Monte Carlo Simulationen	<i>Ab initio</i> -Methode, die auf Auswertung der N-Teilchen-Dichtematrix basiert
QEOS ^{160;161;232}	Quotidian equation of state	Empirische EOS, kombiniert Thomas-Fermi Theorie mit dem Cowan-Modell für Ionen

Tabelle 1.1.: Übersicht über die im nächsten Kapitel diskutierten Zustandsgleichungen (EOS).

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

In diesem Kapitel werden Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium vorgestellt, die einen sehr großen Bereich in der Dichte-Temperatur-Ebene abdecken ($10^{-10} \text{ g/cm}^3 \leq \rho \leq 2000 \text{ g/cm}^3$, $60 \text{ K} \leq T \leq 10^7 \text{ K}$). Das Herzstück dieser Zustandsgleichungen sind Daten, welche aus Dichtefunktionaltheorie-Molekulardynamik Simulationen bei endlichen Temperaturen (DFT-MD) gewonnen wurden. Die theoretischen Grundlagen solcher Simulationen und deren Umsetzung im **Vienna Ab initio Simulation Package**¹⁷⁶⁻¹⁷⁸ (VASP) werden im Abschnitt 2.1 erläutert. Da VASP schon seit langer Zeit in der AG „Statistische Physik“ verwendet wird, ist die DFT-MD und deren Umsetzung in VASP schon in früheren Dissertationen^{98;137;162} sowie in einschlägigen Büchern^{84;170;171} und Review-Artikeln^{157;172} ausführlich beschrieben, sodass die Punkte in dieser Arbeit nur kurz behandelt werden.

Wie sich herausstellen wird, sind DFT-MD Rechnungen mit VASP bei kleinen Dichten nicht mehr möglich, sodass dort andere Zustandsgleichungsmodelle benutzt werden müssen. Die zentralen Aufgaben sind daher zum einen, geeignete Modelle zu finden, welche glatt in die DFT-MD Daten übergehen. Zum anderen muss die resultierende zusammengesetzte Zustandsgleichung in hohem Maße thermodynamisch konsistent sein, siehe Abschnitt 2.4. Die entsprechenden Ergebnisse für Wasserstoff werden in Abschnitt 2.2 vorgestellt, die für Helium im Abschnitt 2.3. Für die Modellierung von Großen Planeten und Braunen Zwergen benötigt man eine Mischungszustandsgleichung aus Wasserstoff, Helium und schwereren Elementen. Die entsprechende lineare H-He-Mischungszustandsgleichung wird in Abschnitt 2.5 eingeführt und mit einer realen Mischungszustandsgleichung verglichen.

2.1. Dichtefunktionaltheorie-Molekulardynamik Simulationen (DFT-MD)

Um die Zustandsgleichungen von Wasserstoff und Helium unter hohen Drücken und Temperaturen bestimmen zu können, muss das Problem des wechselwirkenden Vielteilchensystems (VTS) auf quantenmechanischer Ebene gelöst werden. Der Hamiltonian des VTS $\hat{H} = \hat{K}_i + \hat{K}_e + \hat{U}_{ii} + \hat{U}_{ee} + \hat{V}_{ei}$ setzt sich in dieser Reihenfolge aus den kinetischen Energien \hat{K} der Ionen und Elektronen sowie den Beiträgen der Ion-Ion-, der Elektron-Elektron- und der Elektron-Ion-Wechselwirkung zusammen und hat ausgeschrieben die Form:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{j=1}^{N_i} \frac{\hat{\mathbf{p}}_j^2}{2M_j} + \sum_{k=1}^{N_e} \frac{\hat{\mathbf{p}}_k^2}{2m_e} + \sum_{j=1}^{N_i} \sum_{k=j+1}^{N_i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_j Z_k}{|\hat{\mathbf{R}}_j - \hat{\mathbf{R}}_k|} \\ & + \sum_{j=1}^{N_e} \sum_{k=j+1}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{\mathbf{r}}_j - \hat{\mathbf{r}}_k|} - \sum_{j=1}^{N_i} \sum_{k=1}^{N_e} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_j}{|\hat{\mathbf{R}}_j - \hat{\mathbf{r}}_k|} . \end{aligned} \quad (2.1)$$

Neben den Massen der Ionen M_j und der Elektronen m_e , der Kernladungszahlen Z_j und Z_k sowie der Elementarladung e und der elektrischen Feldkonstante ϵ_0 treten als Operatoren die Impulse $\hat{\mathbf{p}}_j$ und $\hat{\mathbf{p}}_k$ und die Orte $\hat{\mathbf{R}}$ und $\hat{\mathbf{r}}$ der Ionen und der Elektronen auf. Die entsprechende Schrödingergleichung des VTS kann numerisch nicht für mehr als ~ 10 Teilchen gelöst werden¹⁷², da der Rechenaufwand exponentiell mit der Teilchenzahl skaliert. Dieses Problem wird mit einigen Näherungen umgangen, indem man im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung³¹ die Ionen klassisch behandelt und beim Elektronensystem an der dreidimensionalen Dichte und nicht an der N-Teilchen-Wellenfunktion interessiert ist. Grundlage für die Born-Oppenheimer-Näherung ist die unterschiedliche Dynamik der Ionen aufgrund ihrer wesentlich höheren Masse gegenüber den Elektronen, welche über die Dichtefunktionaltheorie (DFT) behandelt werden, die im Folgenden vorgestellt wird.

2.1.1. Dichtefunktionaltheorie und Kohn-Sham-Formalismus

Die Theoreme von Hohenberg und Kohn¹³⁵ konstatieren, dass die Grundzustandsenergie des Elektronensystem vollständig über die Einteilchendichte $n(\mathbf{r})$ des Sy-

stems berechnet werden kann. Ausgehend vom elektronischen Hamiltonian $\hat{H}_e = \hat{K}_e + \hat{U}_{ee} + \hat{V}_{ei}$ besagen die Theoreme, dass wenn zwei Elektronensysteme mit den externen Potentialen $\hat{V}_{ei}^{(1)}$ und $\hat{V}_{ei}^{(2)}$ die gleiche Grundzustandsdichte $n(\mathbf{r})$ haben, so können sich $\hat{V}_{ei}^{(1)}$ und $\hat{V}_{ei}^{(2)}$ nur um eine Konstante unterscheiden. Somit ist das externe Potential \hat{V}_{ei} ein eindeutiges Funktional der Grundzustandsdichte. Da \hat{V}_{ei} gleichzeitig auch \hat{H}_e festlegt, ist die Grundzustandsenergie E_0 als Minimum des Dichtefunktionals $E[n(\mathbf{r})]$ des N-Teilchensystems ebenfalls ein eindeutiges Funktional der Grundzustandsdichte.

Die beiden Theoreme wurden erstmals für das inhomogene Elektronengas bei $T = 0$ K formuliert und später von Mermin²¹⁵ für endliche Temperaturen erweitert, wobei für die Anwendungen in der vorliegenden Arbeit das Dichtefunktional der freien Energie $F[n(\mathbf{r})]$ minimiert werden muss. Für die Formulierung der Theoreme und eines Formalismus zur Umsetzung der DFT, siehe unten, bekam Kohn 1998 den Nobelpreis für Chemie.

Das Dichtefunktional der freien Energie

$$F[n(\mathbf{r})] = K_0 + U_0[n(\mathbf{r})] + V_{ei}[n(\mathbf{r})] - TS_0 + F_{XC}[n(\mathbf{r})]$$

beinhaltet in dieser Reihenfolge die kinetische Energie des Systems aus nicht miteinander wechselwirkender Teilchen, die Hartree-Energie (klassische Wechselwirkung der Elektronen), die Elektron-Ion-Wechselwirkungsenergie, die mit der Temperatur gewichtete Entropie des nicht-wechselwirkenden Systems und dem Austausch-Korrelationsfunktional (XC-Funktional), in dem alle unbekanntenen Wechselwirkungen subsummiert sind:

$$F_{XC}[n(\mathbf{r})] = K_e[n(\mathbf{r})] - K_0 + U_{ee}[n(\mathbf{r})] - U_0[n(\mathbf{r})] - TS_e[n(\mathbf{r})] + TS_0 \quad .$$

In den DFT-Rechnungen in dieser Arbeit wird in VASP jedoch nur das Energie-XC-Funktional $E_{XC}[n(\mathbf{r})]$ benutzt, welches die Entropieterme vernachlässigt. XC-Funktionale für die freie Energie sind in der lokalen Dichtenäherung verfügbar¹⁵⁹, jedoch nicht in VASP implementiert und in der generalisierten Gradientennäherung, siehe unten, noch in der Entwicklung. Erste Tests zeigen, dass unter den thermodynamischen Bedingungen von Jupiter, siehe Kapitel 4, die Verwendung eines $F_{XC}[n(\mathbf{r})]$ statt eines $E_{XC}[n(\mathbf{r})]$ zu Unterschieden im Druck und innerer Energie von weniger als 2% führt²⁹³.

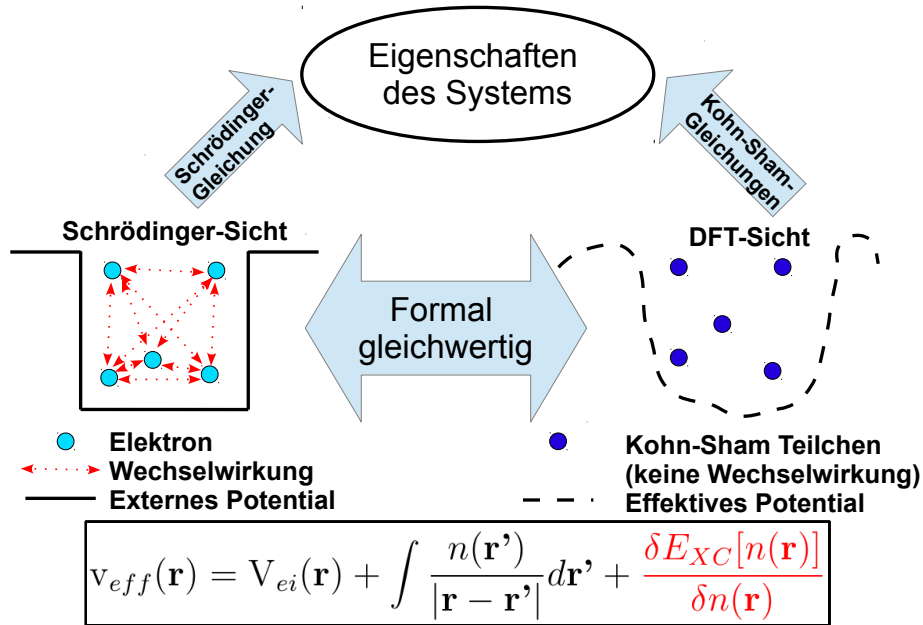


Abbildung 2.1.: Formale Äquivalenz der Lösung des Vielteilchenproblems (wechselwirkendes Elektronensystem im statischen externen Potential der umgebenden Ionen) über die Schrödingergleichung und über die Dichte-Funktionaltheorie (DFT) bei Kenntnis des exakten XC-Funktional, siehe Text, nach Mattson.

Die Minimierung von $F[n(\mathbf{r})]$ durch Variation der Elektronendichte führt auf das sogenannte effektive Potential

$$v_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ei}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{XC}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (2.2)$$

Für das N-Teilchensystem werden dann N Einteilchen-Schrödingergleichungen (1T-SGL) der Form

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{eff}(\mathbf{r}) \right) \Psi_\nu(\mathbf{r}) = \epsilon_\nu \Psi_\nu(\mathbf{r}), \quad \nu = 1, 2, \dots, N \quad (2.3)$$

berechnet um die 1T-Wellenfunktionen und 1T-Energien zu erhalten. Die Summe über das Betragsquadrat der $\Psi_\nu(\mathbf{r})$ gewichtet mit der Fermi-Verteilung $f_\nu = 1/[\exp((E_\nu - \mu)/k_B T) + 1]$ (μ ist das chemische Potential der Elektronen) führt

dann auf die Elektronendichte:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=1}^N f_{\nu} |\Psi_{\nu}(\mathbf{r})|^2 \quad . \quad (2.4)$$

Die Gleichungen 2.2 bis 2.4 sind die Kohn-Sham-Gleichungen¹⁷³, die im Kohn-Sham-Formalismus selbstkonsistent gelöst werden müssen, um die Grundzustandsdichte und damit bei endlichen Temperaturen eine konvergierte minimale freie Energie zu erhalten. Diese Grundzustandsdichte des nicht-wechselwirkenden Systems im effektiven Potential ist die gleiche Dichte, wie die des wechselwirkenden Systems, dessen physikalische Eigenschaften nun berechnet werden können.

Zusammenfassend ist die Idee der DFT noch einmal in einem Bild nach Mattson in Abbildung 2.1 dargestellt: Die Bestimmung der Eigenschaften eines N-Teilchen-Elektronensystems im externen Potential der Ionen über die N-Teilchen-Schrödingergleichung ist formal äquivalent zur Lösung der Ein-Teilchen-Kohn-Sham-Gleichungen von nicht-wechselwirkenden Kohn-Sham-Teilchen in einem effektiven Potential, wenn das XC-Funktional exakt bekannt wäre. Beide Formalismen würden zu identischen physikalischen Größen führen.

Die essenzielle Größe in der DFT ist demnach das Austausch-Korrelationsfunktional, dessen Wahl neben der Born-Oppenheimer-Näherung die einzige physikalische Näherung zur Beschreibung des VTS im Rahmen der DFT-MD ist. Unter den verfügbaren XC-Funktionalen kann man zwischen solchen unterscheiden, deren Ergebnisse an empirische Daten angepasst sind, um bestimmte Größen wie z.B. die Gitterkonstante eines Festkörpers zu reproduzieren, und solchen, die keine justierbaren Parameter haben und somit *ab initio*-XC-Funktionale genannt werden können. In diese Klasse fällt auch das Funktional von Perdew, Burke und Ernzerhof²⁵³ (PBE) welches im Rahmen der generalisierten Gradientennäherung (GGA) entwickelt wurde und für fast alle Rechnungen in dieser Dissertation genutzt wurde. Im Gegensatz zur einfacheren lokalen Dichtenäherung (LDA)^{173;254;255}, die nur die lokale Elektronendichte $n(\mathbf{r})$ im XC-Funktional berücksichtigt, bezieht die GGA auch die Gradienten von $n(\mathbf{r})$ mit ein. In der Literatur findet man extensive Tests zu Vorhersagen verschiedener Funktionale bezüglich der Bandlücke^{130;149;251}, dem Kompressionsmodul^{130;182}, der Bindungslänge von Molekülen^{122;129;297}, sowie der Gitterkonstante in Festkörpern^{120;121;130;149;182;295}, auf die hier verwiesen wird.

Weitere XC-Funktionale, die in dieser Arbeit verwendet werden, sind neben dem

PBE- und einem LDA-Funktional auch das Hybrid-Funktional von Heyd, Scuseria und Ernzerhof (HSE)^{131;132}, welches nicht-lokale Austauschbeiträge mit berücksichtigt und damit die Fehler infolge der Selbstwechselwirkung in der DFT weitgehend kompensiert¹²⁶, aber damit auch numerisch wesentlich aufwändiger ist. Außerdem wird das van-der-Waals XC-Funktional vdw-DF2^{73;187;274;311}, welches zu den lokalen Beiträgen auch nicht-lokale Dispersionskräfte berücksichtigt, genutzt, siehe Kapitel 3.

2.1.2. Umsetzung der DFT-MD in VASP

Der Kohn-Sham-Formalismus zur Berechnung der Eigenschaften des Elektronensystems ist in VASP implementiert. Da dieser Code ursprünglich für Festkörperberechnungen entwickelt wurde, werden die elektronischen Wellenfunktionen durch ebene Wellen repräsentiert. Dadurch können periodische Randbedingungen oder die sehr häufig durchzuführenden Fouriertransformationen einfach realisiert werden. Es entstehen aber auch Nachteile durch die Wahl dieses Basissatzes. Simuliert man beispielsweise sehr dünne Systeme nahe dem idealen Gas, so erstrecken sich die signifikanten Beiträge der Wellenfunktionen über einen großen Raum und man muss ebene Wellen bis zu einem sehr hohen Energie-Cutoff mit berücksichtigen. Dies führt bei sehr kleinen Dichten dazu, dass nur sehr wenig Teilchen berechnet werden können oder die Simulation ganz abbricht. Andererseits ist die elektronische Wellenfunktion im Coulombpotential in der Nähe der Ionen stark oszillierend, sodass auch hier wieder ebene Wellen mit sehr hohen Energien in der Entwicklung mitgenommen werden müssen.

Um dieses Problem zu umgehen werden bei moderaten Dichten (bei Wasserstoff und Helium $\rho \leq 9 \text{ g/cm}^3$) die Elektron-Ion-Wechselwirkungen nicht durch das reine Coulombpotential beschrieben, sondern durch sogenannte Projector Augmented Wave Potentiale (PAW)^{25;179}. Bei dieser Methode wird innerhalb eines Cutoff-Radius um einen Kern die stark oszillierende Wellenfunktion (WF) durch eine glatte Pseudowellenfunktion ersetzt, die dann numerisch einfacher behandelt werden kann. Die Norm der Wellenfunktion bleibt dabei erhalten. Durch eine lineare Transformation kann beim PAW-Ansatz die reale WF aus der Pseudo-WF zurückgewonnen werden. Die Nutzung solcher PAW-Potentiale ist jedoch keine

physikalische Näherung. Sie führen im Bereich ihrer Anwendbarkeit zu den gleichen Ergebnissen wie das echte Coulombpotential, was in Konvergenztests geprüft werden muss und bei den Rechnungen in dieser Arbeit in Anlehnung an die extensiven Test in der Dissertation von Lorenzen¹⁹³ getan wurde.

Eine weitere numerische Vereinfachung betrifft die Auswertung der Elektronenstruktur. Statt Integrale zu lösen wird über einen diskreten Satz von \vec{k} -Punkten in der Brillouin-Zone summiert. In VASP hat man die Möglichkeit, ganze \vec{k} -Punkt-Gitter nach Monkhorst und Pack²²⁵ zu verwenden oder an ausgezeichneten Punkten, wie dem Γ -Punkt oder dem Baldereschi-Punkt¹² zu rechnen, siehe Abbildung 2.2. Auch hier muss die Konvergenz stets getestet werden. Für die thermodynamischen Größen stellt sich der Baldereschi-Punkt meistens als völlig ausreichend heraus. Bei Transporteigenschaften müssen höhere \mathbf{k} -Punkt-Sätze für konvergierte Ergebnisse verwendet werden, siehe Kapitel 5.

Ist über den DFT-Zyklus die Grundzustandsdichte gefunden, so können über das Hellmann-Feynmann-Theorem die Kräfte der Elektronen auf die Ionen aus den Born-Oppenheimer-Energieflächen E_0 ausgerechnet werden.

Die Ionen werden in VASP im Sinne einer klassischen Molekulardynamik durch Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen über einen vorgegebenen, diskreten Zeitschritt propagiert:

$$M_j \ddot{\mathbf{R}}(t) = -\nabla_j \hat{U}_{ii} - \nabla_j E_0 \quad .$$

Dies geschieht so lange, bis sich im System ein thermodynamisches Gleichgewicht eingestellt hat.

An dieser Stelle muss die besondere Stärke der DFT-MD Simulationen hervorgehoben werden. In klassischen Molekulardynamiksimulationen (MD) wie auch bei Rechnungen im chemischen Bild werden die Wechselwirkungen über effektive Potentiale (Morsepotential, Exponential-6-Potentiale, Debyepotential) berechnet, die global genutzt werden. Bei den DFT-MD-Simulationen wird die Wechselwirkung der Elektronen mit den Ionen in jedem Zeitschritt neu ausgewertet und ist somit dichte- und temperaturabhängig und kann so Korrelationen viel genauer abbilden. Deshalb ist diese Methode im Temperaturbereich von einigen Elektrenvolt und Festkörperdichten (warme, dichte Materie: WDM) so erfolgreich.

Ebenfalls soll an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, dass die Behandlung

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

von Quanteneffekten der Ionen wie die Nullpunktsbewegung a posteriori geschehen muss, wie im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

Die DFT-MD-Simulationen in dieser Arbeit werden im kanonischen Ensemble durchgeführt mit dem thermodynamischen Potential der freien Energie $F(T, V, N)$. Die Teilchenzahl N und das Volumen der Simulationsbox werden von vornherein festgelegt. Die Temperatur des Elektronensystem wird über die Fermiverteilung eingestellt, siehe Gleichung 2.4. Das Ionensystem wird über den Nosé-Hoover-Thermostaten²⁴⁸ an ein Wärmebad gekoppelt, welches periodisch dem System Wärme zuführt und entzieht. Die Periode dieses Thermostaten beträgt standardmäßig 40-MD-Zeitschritte. Da die Länge eines Zeitschrittes i.d.R. etwa 1/30 der Molekülschwingungen im System sein sollte⁷ ist der Thermostat gut an das System gekoppelt und sorgt trotz der Fluktuationen um einen Mittelwert der vorgegebenen Temperatur für eine schnelle Konvergenz des Systems in das thermodynamische Gleichgewicht.

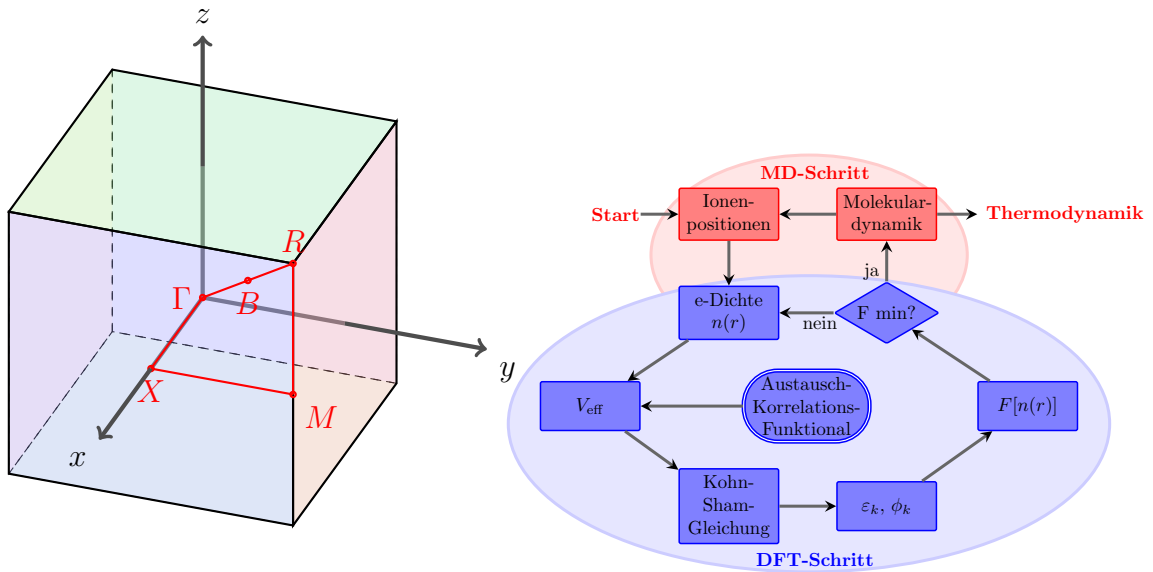


Abbildung 2.2.: Linkes Bild: Kubische Brillouin-Zone mit ausgezeichneten Punkten wie dem Γ -Punkt bei $(0,0,0)$. Der Baldereschi-Punkt¹² bei $(1/4,1/4,1/4)$ wird in dieser Arbeit zur Auswertung thermodynamischer Größen verwendet. Rechts: Zusammenspiel von DFT-Zyklus und Molekulardynamik in VASP, siehe Text. Beide Bilder mit freundlicher Genehmigung von Winfried Lorenzen.

Zusammenfassend kann die Implementierung der DFT-MD in VASP am Flussdiagramm in Abbildung 2.2 noch einmal nachvollzogen werden: Eine Simulationsbox wird mit vorgegebener Teilchenzahl, Temperatur und vorgegebenen Volumen initialisiert und die Ionen entsprechend einer vorzugebenden Geometrie angeordnet. Dann folgt der Schritt in die DFT-Schleife. Der Kohn-Sham-Formalismus wird zu einer anfangs geratenen Elektronenverteilung durchgeführt und mit den sich daraus ergebenden Werten für die freie Energie und die Elektronendichte so lange iteriert, bis die minimale freie Energie und damit die Grundzustandsdichte der Elektronen gefunden wurde. Ist F minimal, werden dann die Kräfte auf die Ionen ausgerechnet und diese dann propagiert. Für die neue Ionenkonfiguration wird die Prozedur erneut ausgeführt, bis sich ein thermodynamisches Gleichgewicht eingestellt und man genügend Zeitschritte für eine gute Statistik der gewünschten Größe (z.B. Druck oder Viskosität) erhalten hat. An dieser Stelle soll noch einmal folgendes verdeutlicht werden: Benutzt man in den DFT-MD-Rechnungen ein XC-Funktional, welches nicht an empirische Daten angepasst ist oder keinen variablen Parameter hat, wie das PBE-Funktional, so ist das Ergebnis der Rechnung nur von den vorgegebenen Dichten und Temperaturen abhängig (bei Sicherstellung der Konvergenz bezüglich der oben beschriebenen Parameter). Solche Rechnungen werden als *ab initio*-Rechnungen bezeichnet und im Folgenden für Wasserstoff und Helium durchgeführt.

2.2. Zustandsgleichung von Wasserstoff (H-REOS.3)

Als einfachstes und häufigstes Element im Universum hat Wasserstoff ein komplexes Hochdruckphasendiagramm, siehe Abbildung 2.3. Die theoretische Schmelzdrucklinie⁴⁵ weist ein Maximum auf, welches experimentell bestätigt ist^{67;85;113;304} und unter der sich die vier verschiedenen Festkörperphasen^{86;141;329} befinden. Des Weiteren treten in Wasserstoff sowohl Dissoziation und Ionisation auf, welche sowohl Temperatur- als auch Druck-getrieben sein können. Der Übergang vom nichtleitenden zum leitendem Wasserstoff kann sowohl kontinuierlich³²⁰ als auch in Form eines Phasenübergangs erster Ordnung (engl. PPT: plasma phase tran-

sition) stattfinden, siehe Kapitel 3.5 und die grünen Koexistenzkurven im Bild, sowie das blaue Gebiet aus dem Experiment von Knudson *et al.*¹⁶⁷. Die Isentropen von Jupiter (orange) und dem Braunen Zwerg Gliese-229b (braun) sowie die Hugoniotkurve liegen jedoch im Gebiet des kontinuierlichen Übergangs.

Abgesehen von einer expliziten Phononenbehandlung des Festkörpers⁴⁵ ist diese komplexe Physik in der Wasserstoffzustandsgleichung H-REOS.3 abgebildet, welche für astrophysikalische Anwendungen modelliert wurde und im Folgendem vorgestellt werden soll. Dass die entsprechenden Festkörperexperimente trotzdem sehr gut reproduziert werden, ist im Kapitel 3.1 dargestellt.

Die H-REOS.3 besteht aus vier Teilen, siehe Abbildung 2.4. Der stark korrelierte Bereich der warmen dichten Materie wird durch DFT-MD-Daten beschrieben, die im Abschnitt 2.2.1 vorgestellt werden. Der vollständig ionisierte Bereich wird durch das Model von Chabrier und Potekhin (CP) abgedeckt, siehe Abschnitt 2.2.3. Der Anschluss der DFT-MD-Daten zu niedrigen Dichten, siehe Abschnitt 2.2.2, wird unterhalb von 10000 K an die FVT/FVT⁺-Zustandsgleichung durchgeführt, welche die Dissoziation und beginnende Ionisation im schwach korrelierten System gut beschreiben kann. Das partiell ionisierte Plasma oberhalb von 10000 K wird durch die Zustandsgleichung von Saumon *et al.*²⁸⁴ (SCvH) behandelt, welche bei noch höheren Temperaturen glatt in das CP-Modell übergeht. Tritt die Ionisation genau an der Grenzfläche zwischen DFT-MD-Daten und der SCvH-EOS auf, so muss in diesem Bereich interpoliert werden, um die thermodynamische Konsistenz zu erhalten. Dies geschieht unter Berücksichtigung von Pfadintegral-Monte-Carlo-Daten, siehe Abschnitt 2.2.2, welche zu den *ab initio*-Methoden zählt wie die jetzt folgenden DFT-MD-Daten.

2.2.1. DFT-MD-Daten

Die DFT-MD-Daten für Wasserstoff wurden mit VASP aus Simulationen mit jeweils 256 Atomen berechnet. Die thermodynamischen Größen wurden am Baldereschi-Punkt¹² ausgewertet. Der Zeitschritt im molekularen System betrug 0,3 fs um die Molekülschwingungen sehr gut auflösen zu können, während im atomaren System auch bis zu 1 fs gewählt wurde. Die Gesamtsimulationszeit für die thermodynamischen Größen einer Dichte-Temperatur-Konfiguration lag zwischen

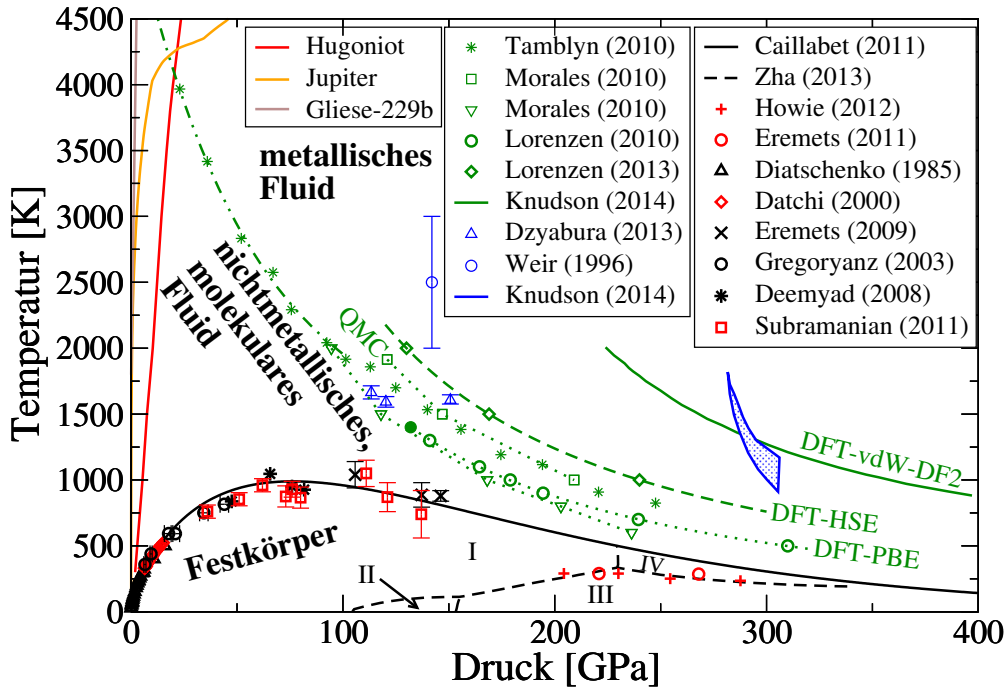


Abbildung 2.3.: Hochdruckphasendiagramm von Wasserstoff. Zu sehen sind ganz links die Isentropen von Jupiter und Gliese-229b (siehe Kapitel 4) und die Hugoniotkurve (Kapitel 3). Unterhalb der theoretisch berechneten schwarzen Schmelzdrucklinie⁴⁵ (mit den zugehörigen Experimenten^{65;67;72;85;113;304}) sind die vier experimentellen Festkörperphasen^{86;141;329} gezeigt. Für den kontinuierlichen Nichtmetall-Metall-Übergang (NMT) im fluiden Wasserstoff ist das Experiment von Weir *et al.*³²⁰ und für den Übergang erster Ordnung die Experimente von Dzyabura *et al.*⁷⁷ und Knudson *et al.*¹⁶⁷ abgebildet. Theoretische Vorhersagen aus DFT-Rechnungen für $P-T$ -Punkte mit 50% Dissoziationsgrad³⁰⁷ sowie für die Lage der Koexistenzlinie des NMT basierend auf dem PBE-^{196;230}, dem HSE-¹⁹⁴ und dem vdW-DF2-Funktional¹⁶⁷ und QMC-Rechnungen²³⁰ werden durch grüne Linien und Symbole dargestellt.

3 und 10 ps. Als Austausch-Korrelationsfunktional wurde die Implementierung der generalisierten Gradientennäherung nach Perdew, Burke und Ernzerhof²⁵³ gewählt und die Iontemperatur wurde mit einem Nosé-Hoover-Thermostat²⁴⁸ kontrolliert. Die Behandlung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ionen und den Elektronen erfolgte in Abhängigkeit von der simulierten Dichte. Für $\rho < 2 \text{ g/cm}^3$

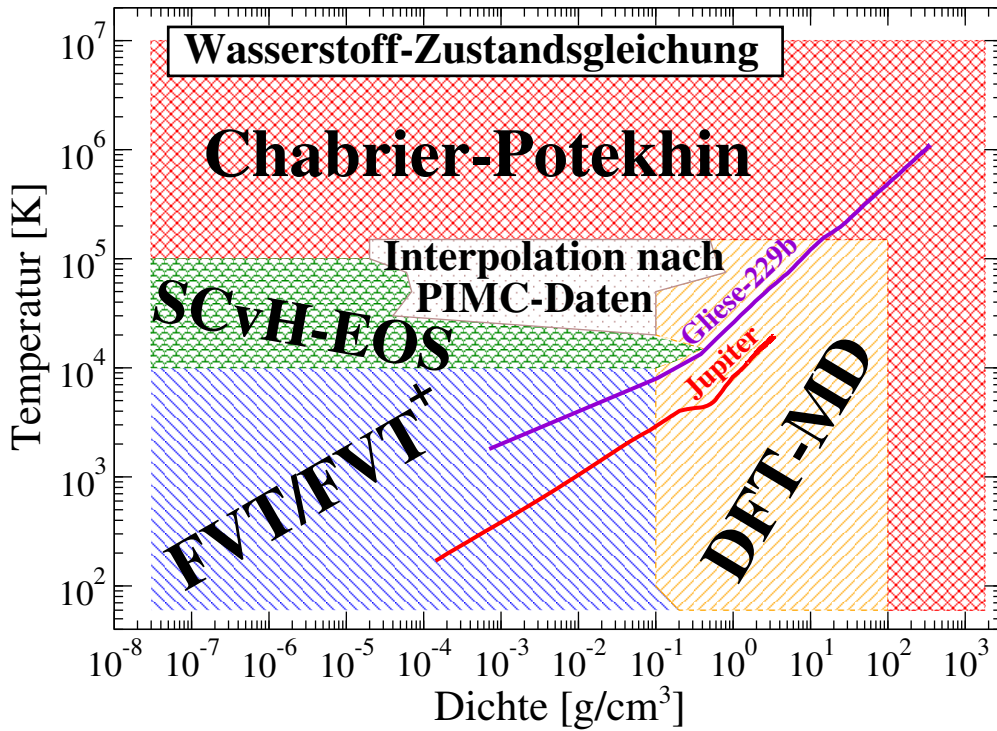


Abbildung 2.4.: Zusammensetzung der H-REOS.3-Zustandsgleichung^{18,[A2]}. Die DFT-MD-Daten (orange) werden zu hohen Dichten und Temperaturen durch das CP-Modell (rot) ergänzt und der Anschluss zu niedrigen Dichten an das FVT/FVT⁺-Modell^{139;158} (blau) und die SCvH-EOS²⁸⁴ (grün) realisiert. Ein größerer Bereich des partiell ionisierten Plasmas wurde in Anlehnung an die PIMC-Daten von Hu *et al.*¹⁴² interpoliert (brauner Bereich). Die Isentropen von Jupiter (rot) und Gliese-229b (violett) sind als Vergleich mit aufgetragen, wobei die Dichte die Partialdichte von Wasserstoff in der linearen Mischung ist, siehe Kapitel 2.5. Das entsprechende Phasendiagramm ist in Abbildung 2.3 zu sehen.

wurde das in VASP implementierte PAW-Potential^{25;179} für PBE-Rechnungen genutzt. Dieses hat einen Cutoff-Radius von 0,52 Å und liefert konvergierte Ergebnisse bei einem Energie-Cutoff der ebenen Wellen von 1200 eV. Bei höheren Dichten überlappen sich die PAW-Sphären immer mehr und es muss für konvergierte Ergebnisse sichergestellt werden, dass in der PAW-Sphäre eines Protons, kein zweites liegt. Deswegen wurden für Dichten $2 \text{ g/cm}^3 \leq \rho \leq 9 \text{ g/cm}^3$ das härtere Wasserstoffpotential mit einem Cutoff-Radius von 0,43 Å ebenfalls mit einem

Energie-Cutoff von 1200 eV verwendet. Auch dieses versagt jedoch bei Dichten über 9 g/cm^3 , sodass hier das volle Coulomb-Potential verwendet wurde. Dieses benötigt einen wesentlich höheren Energie-Cutoff von 3-10 keV. Da in VASP die Ionen klassisch behandelt werden, müssen Quanteneffekte wie die Nullpunktsbewegung (engl. ZPM: zero-point motion) im Nachhinein behandelt werden.

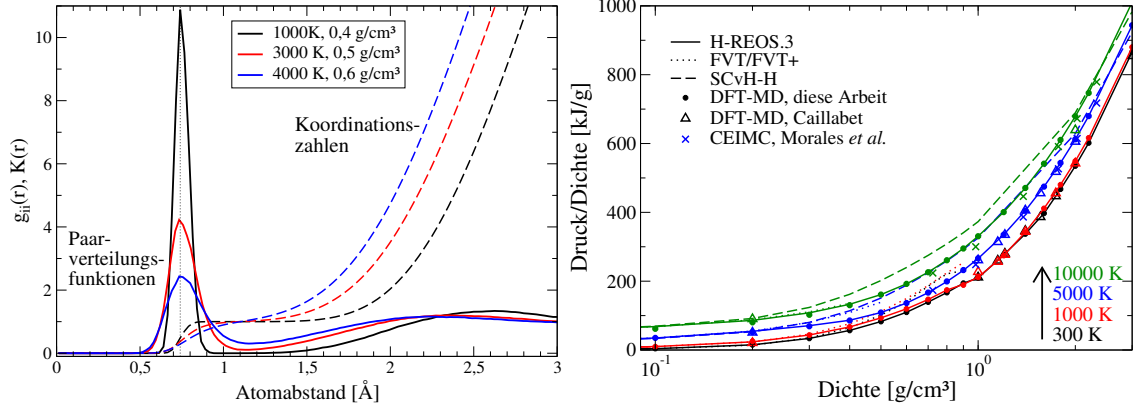


Abbildung 2.5.: Paarverteilungsfunktion $g_{ii}(r)$ (durchgezogen) für verschiedene Punkte entlang der Hugoniotkurve (siehe Kapitel 3) zusammen mit der entsprechenden Koordinationszahl $K(r)$ (gestrichelt). Die gepunktete Linie deutet den Molekülpeak bei $0,741 \text{ Å}$ an. Rechts: P/ρ -Isothermen von Wasserstoff [A8] aus den untersuchten Modellen, siehe Text, im Vergleich mit der H-REOS.3.

Für die Ionen, die in Molekülen gebunden sind, wurde folgendes Schema verwendet, siehe auch Holst *et al.*¹⁴⁰: Der Anteil von Molekülen an der Gesamtteilchenzahl α_M in der Box kann über die Koordinationszahl, einem gewichteten Integral über die ionische Paarverteilungsfunktion $g_{ii}(r)$,

$$K(r) = \frac{N-1}{V} \int_0^r 4\pi r'^2 g_{ii}(r') dr' \quad (2.5)$$

bestimmt werden. N ist die Anzahl der simulierten Teilchen in der Box mit dem Volumen V . Der doppelte Wert von $K(r)$ am Molekülpeak bei $0,741 \text{ Å}$, siehe Abbildung 2.5, entspricht dem Anteil der Atome α_m , die in Molekülen gebunden sind. Die dann angewandte quantenmechanische Schwingungskorrektur zur inneren Energie pro Teilchen

$$\Delta U = \alpha_m \frac{1}{2} k_B \left(\Theta_{vib} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\Theta_{vib}/T) - 1} \right) - T \right) \quad (2.6)$$

ist die Addition der Beiträge des quantenmechanischen harmonischen Oszillators und die Subtraktion des klassischen Schwingungsanteils pro Atom $k_B T/2^{101}$. T ist die Temperatur des Systems und k_B die Boltzmann-Konstante. Die charakteristischen Schwingungstemperaturen für Wasserstoff $\Theta_{vib}^{H_2} = 6338,2$ K und für bestimmte Anwendungen auch Deuterium $\Theta_{vib}^{D_2} = 4482$ K wurden Huber und Herzberg¹⁴⁷ entnommen. Dieser Ansatz weist jedem Molekül eine einzige charakteristische Schwingungstemperatur zu. Alternativ kann man auch das gesamte Schwingungsspektrum über eine Geschwindigkeitsautokorrelationsfunktion berechnen, siehe Bethkenhagen *et al.*²³ und entsprechende Referenzen in dieser Publikation. Eine ähnliche quantenmechanische Behandlung der Rotation kann vernachlässigt werden, da die Schwingungen die Hauptbeiträge liefern¹³⁷. Ebenfalls vernachlässigt wird die ZPM für Protonen, die nicht in Molekülen gebunden sind. Quanten-Monte-Carlo Rechnungen wie die von Morales *et al.*²²⁹ können diese konsistent berechnen. Basierend auf diesen Ergebnissen können wir den maximalen Fehler aufgrund der protonischen ZPM auf 1 % in der thermischen und 0,5 % in der kalorischen Zustandsgleichung im teilweise dissoziierten oder atomaren System abschätzen.

Im rechten Bild von Abbildung 2.5 sind die Isothermen für 300 K, 1000 K, 5000 K und 10000 K der H-REOS.3 im Vergleich mit der SCvH-EOS (gestrichelt), FVT/FVT⁺-Daten (gepunktet) zu sehen. Die DFT-MD-Daten von Cailabet⁴⁴ (Dreiecke) und aus der vorliegenden Arbeit (Kreise) auf Basis des PBE-XC-Funktional, sowie Daten aus coupled electron-ion Monte-Carlo Simulationen (CEIMC)²²⁹ sind ebenfalls dargestellt. Für 300 K und 1000 K sind SCvH-Daten nur bis 0,1 g/cm³ verfügbar. Bei höheren Temperaturen überschätzen sie und die FVT/FVT⁺-Daten den Druck deutlich, während die verbleibenden *ab initio*-Ergebnisse sehr gut übereinstimmen.

2.2.2. Anschluss zu niedrigen Dichten

DFT-MD Rechnungen für niedrige Dichten (bei Wasserstoff: $\rho \ll 0,1$ g/cm³) sind mit VASP nicht möglich. Wie schon erwähnt, liegt dies an der Repräsentation der Wellenfunktionen durch ebene Wellen, welche bei kleineren Dichten einen immer größeren Energie-Cutoff benötigen, sodass das Problem numerisch nicht mehr

traktabel ist. Andererseits ist bei niedrigen Dichten nicht mit starken Korrelationen zu rechnen, sodass numerisch einfachere Modelle im chemischen Bild zu sehr guten Ergebnissen führen sollten. Im Gegensatz zum physikalischen Bild, in dem nur Elektronen und Ionen wechselwirkend über das Coulomb-Potential durch näherungsweise Lösen der N-Teilchen-Schrödingergleichung (z.B. DFT-MD) behandelt werden, sind im chemischen Bild Bindungszustände als stabile neue Teilchensorten neben den elementaren Teilchen (Elektronen, Protonen) möglich. Für Wasserstoff werden im Allgemeinen die Reaktionen und die Teilchensorten $\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{H}$ (Dissoziation) und $\text{H} \rightleftharpoons \text{H}^+ + e$ (Ionisation) betrachtet, welche über effektive Wechselwirkungspotentiale interagieren und deren Anteile an der Gesamtteilchenzahl mit Hilfe von Saha-Gleichungen bestimmt werden, siehe auch Abschnitt 2.3.2.

Zu diesen Modellen im chemischen Bild gehören unter anderem die Fluid Variational Theory (FVT/FVT⁺) und die SCvH-Zustandsgleichung. Die FVT²⁷⁷ basiert auf der Gibbs-Bogolyubov-Ungleichung:

$$F \leq F_0 + \langle \Phi - \Phi_0 \rangle_0 \quad ,$$

die besagt, dass die freie Energie des wechselwirkenden Systems kleiner oder gleich der freien Energie des Referenzsystems (hier ein System aus harten Kugeln (HK) F_0) und dem Mittelwert der Differenz zweier Wechselwirkungspotentiale, der über alle Zustände des Referenzsystems gebildet wird, ist. Während Φ_0 das HK-Potential ist, werden für Φ im Falle der Molekül-Molekül- beziehungsweise Atom-Atom-Wechselwirkung an Experimente angepasste Exponential-6-Potentiale genutzt^{266;277}. Zusammen mit den idealen Beiträgen zur freien Energie der Elektronen und Ionen erhält man dann das thermodynamische Potential für das Gesamtsystem. Ausgehend von dem daraus folgenden chemischen Potential des atomaren Systems berechnet die FVT⁺ dann zusätzlich das Massenwirkungsgesetz zur Behandlung der Ionisation, siehe oben.

Im SCvH-Modell werden Dissoziation und Ionisation ebenfalls behandelt. Neben den idealen Beiträgen zur freien Energie folgt der Beitrag aus den Atom- und Molekülwechselwirkungen aus der Fluid Perturbation Theory^{318;319}. Wechselwirkungen zwischen geladenen und neutralen Teilchen werden durch ein Polarisationspotential²⁶⁵ beschrieben. In die Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den geladenen Teilchen fließen die Polarisierbarkeit des Elektronenfluids⁵³ und entsprechende

Padé-Formeln¹⁵², hypernetted-chain-Berechnungen für das Elektron-Ion-System, welches über ein Debye-Potential wechselwirkt, sowie ein Modell für das Zwei-Komponenten-Plasma, welches den Debye-Hückel-Grenzfall erfüllt, ein. Aus der Minimierung der resultierenden freien Energie^{110;148} erhält man dann die thermodynamischen Größen entsprechend der vorgegebenen Dichte und Temperatur.

Sowohl die SCvH-EOS als auch die FVT/FVT⁺-Daten werden in der H-REOS.3 für den Anschluss der DFT-MD-Daten in den Bereich kleinerer Dichten genutzt, siehe Abbildung 2.4. Bis 10000 K gehen die FVT/FVT⁺-Daten sehr glatt in die DFT-MD-Ergebnisse über. Kritisch ist der Übergang in Bereichen, wo Ionisation auftritt, insbesondere an der linken Grenzfläche der DFT-MD-Daten oberhalb von 10000 K. Die Vorhersagen für den Druck und die innere Energie zwischen den einzelnen Modellen, insbesondere FVT⁺ und SCvH variieren hier sehr stark aufgrund der verschiedenen Näherungen für die Wechselwirkung zwischen den Teilchen, so dass sich aus folgendem Grund für die SCvH-Daten als Niederdichteanschluss oberhalb von 10000 K entschieden wurde: In Abbildung 2.6 sind die Isothermen der inneren Energie (rechts) und des Quotienten aus Druck und Dichte (links) zu sehen. In dieser Darstellung des Drucks können nicht-ideale Beiträge zur EOS als Abweichungen vom horizontalen Verhalten bei konstanter Temperatur (ideales Gas: $P/\rho = RT/M$) identifiziert werden.

Deutlich zu sehen ist, dass die Pfadintegral-Monte-Carlo-Ergebnisse (PIMC) von Hu *et al.*¹⁴² (Dreiecke), welche für kleine und moderate Dichten zugänglich sind, in der Regel sehr gut in die vorhandenen DFT-MD-Ergebnisse (Kreise) übergehen. Da diese PIMC-Daten für kleinere Dichten ebenfalls sehr gut mit den SCvH-Daten (gestrichelte Kurven) übereinstimmen und die FVT⁺-Ergebnisse (gepunktete Kurven) stark davon abweichen, wurde die SCvH-EOS für kleine Dichten in der H-REOS.3 (durchgezogene Linien) ausgewählt. Die Interpolation über das Gebiet, wo Ionisation genau am Übergang zwischen der SCvH-EOS und den DFT-MD-Daten stattfindet und zu deutlich unterschiedlichen Vorhersagen für Druck und innere Energie führt, geschieht dann unter Berücksichtigung der PIMC-Daten, siehe Bild. Damit entsteht ein glatter Übergang und die thermodynamische Konsistenz bleibt weitestgehend erhalten, siehe Abschnitt 2.4.

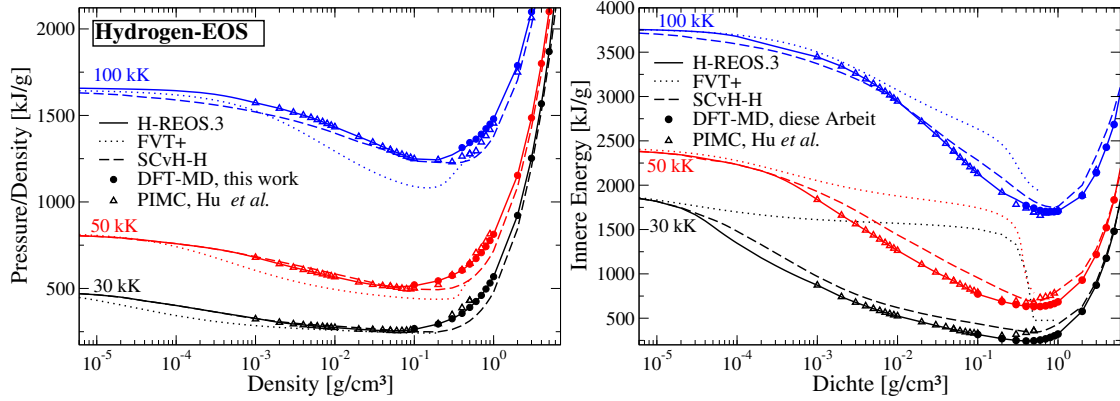


Abbildung 2.6.: Anschluss der DFT-MD-Daten zu niedrigen Dichten im partiell ionisierten Plasma [A2]. Die Verbindung der SCvH-H-Daten²⁸⁴ mit den DFT-MD-Daten wird durch Interpolation über PIMC-Daten¹⁴² im Druck (linkes Bild) und innere Energie (rechtes Bild) realisiert.

2.2.3. Anschluss zu sehr hohen Dichten

Um im Bereich des vollständig ionisierten bzw. stark entarteten Plasmas auf die aufwändigen DFT-MD-Rechnungen verzichten zu können, wurden verschiedene einfachere Modelle, welche die freie Energie des Systems berechnen, untersucht.

Historisch naheliegend ist das Thomas-Fermi-Modell (TFM)^{88;310}, welches die thermodynamischen Eigenschaften des Elektronensystems in Abhängigkeit von der Elektronendichte berechnet. Dazu wird das Elektron-Ion-System in an den Rändern ladungsneutrale Wigner-Seitz-Zellen unterteilt. In diesen Zellen bewegen sich die Elektronen als Fermigas im selbstkonsistenten elektrostatischen Feld der Ionen. Die Lösung der Thomas-Fermi-Gleichung führt dann auf die Elektronendichte für diese Konfiguration. Da Bindungen vernachlässigt werden, überschätzt das TFM in der Regel den Druck des Elektronensystems, führt aber zu vernünftigen Ergebnissen in vollständig ionisierten und entarteten Systemen bei hohen Dichten. Eine Formulierung des TFM bei endlichen Temperaturen gelang Feynman *et al.*⁸⁹, welche dann in das sogenannte QEOS-Modell (quotidian equation of state)²³² einfließt. Im QEOS-Modell werden zusätzlich zu den Elektronenbeiträgen aus dem TFM auch die Ionenbeiträge über ein empirisches Modell (das sog. Cowan-Modell²³²) und eine Bindungskorrektur berücksichtigt. Um die QEOS- und TFM-Daten zu generieren wurde der Code von Faik⁸⁷ genutzt, welcher auf der Im-

plementierung von Kemp basiert^{160;161}. Die Ergebnisse für die 100 K- (schwarz) und 100 kK-Isothermen (rot) sind in Abbildung 2.7 zu sehen. Die Beiträge aus dem reinen TFM sind gestrichelt und die QEOS-Daten gepunktet dargestellt zusammen mit Ergebnissen des Chabrier-Potekhin-Modells (CPM)^{56;260} (durchgezogene Kurven), siehe unten, und DFT-MD-Daten (Sterne). Die gegebenen prozentualen Abweichungen sind die der H-REOS.3-Daten (DFT-MD) relativ zu den CPM-Daten. Bei 100 K sorgen die Bindungskorrekturen im QEOS-Modell dafür, dass dessen Kurve unter der des reinen TFM liegt, im Gegensatz zu 100 kK, wo der Einfluss von Bindungen wegen der hohen Temperatur verschwinden muss. Dort addieren sich im QEOS-Modell nur Elektronen- und Ionenbeitrag und die Kurve liegt über dem TFM-Resultat. Bei sehr hohen Dichten nähern sich alle Kurven in Abbildung 2.7 asymptotisch an, wobei der Fehler zwischen TFM und DFT-MD $\sim 5\%$ beträgt, deutlich schlechter als DFT-MD verglichen mit dem CPM. Diese Abweichungen genügen nicht der Genauigkeit, die für die H-REOS.3 angestrebt wird, sodass das Modell für die freie Energie des vollständig ionisierten Plasmas beliebiger Entartung von Chabrier und Potekhin (CPM)^{56;260} im Folgenden untersucht wird.

Das CPM zerlegt die freie Energie in ideale Beiträge und einen sog. Exzessterm: $F = F_{id}^i + F_{id}^e + F_{ex}$. Die idealen Ionenbeiträge werden dabei klassisch behandelt und die der Elektronen über Fermi-Dirac-Integrale bestimmt, sodass sie für beliebige Entartung und relativistische Effekte gültig sind. Der Exzessterm $F_{ex} = F_{ee} + F_{ii} + F_{ie}$ beinhaltet die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen F_{ee} und Ionen F_{ii} untereinander und miteinander F_{ie} . Während F_{ee} aus den Padé-Formeln nach Ichimaru *et al.*¹⁵² berechnet wird, nutzt das CPM für F_{ii} einen Ausdruck für das Ein-Komponenten-Plasma (OCP), indem zwischen Monte-Carlo-Ergebnissen für starke Kopplung⁷¹ und dem Debye-Hückel-Grenzfall schwacher Kopplung interpoliert wird. Der Beitrag aus der Elektron-Ion-Wechselwirkung F_{ie} wird über den hypernetted-chain-Ansatz zur Lösung der Ornstein-Zernike-Gleichung mit einem Debye-Wechselwirkungspotential berechnet⁵³.

Die 100 K und die 100 kK-Isothermen des CPM sind ebenfalls in Abbildung 2.7 zu sehen. Offensichtlich gibt es eine beeindruckende Übereinstimmung (Abweichung $\leq 0,5\%$ und besser) des CPM mit den DFT-MD-Daten für Dichten $\rho > 15 \text{ g/cm}^3$ sowohl für niedrige als auch hohe Temperaturen. Deshalb werden bei allen Iso-

thermen der H-REOS.3 ab einer Dichte von $\rho > 70 \text{ g/cm}^3$ sowie für alle Dichten bei Temperaturen $T \geq 200 \text{ kK}$ Daten des CPM verwendet. Diese Temperatur wurde gewählt, weil Wasserstoff hier allein schon durch thermische Anregung ($T > (4,5/2 + 13,6) \text{ eV} \sim 184 \text{ kK}$) dissoziiert und ionisiert wird.

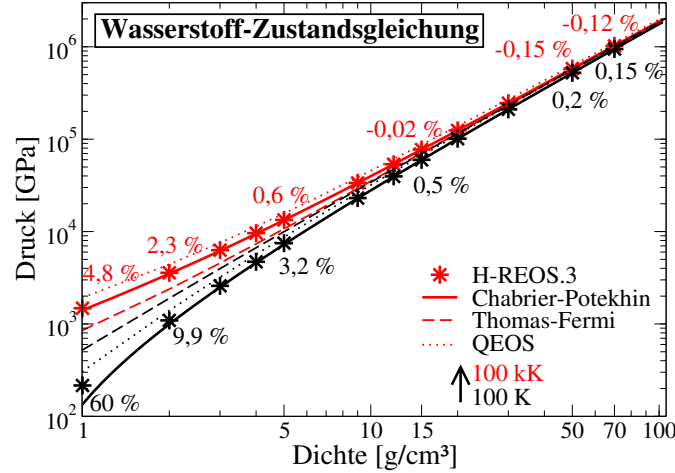


Abbildung 2.7.: Hochdichteanschluss in der H-REOS.3 [A2]: DFT-MD-Daten aus der H-REOS.3¹⁸ (Sterne) werden bei 100 K (schwarz) und 100 kK verglichen mit dem Modell von Chabrier und Potekhin⁵⁶ für das vollständig ionisierte Plasma, siehe prozentuale Abweichungen. Als weitere Vergleichskurven sind das Thomas-Fermi-Modell⁸⁹, sowie das QEOS-Modell²³² zu sehen.

Für eine bessere Vergleichbarkeit der Zustandsgleichungen mit anderen Modellen sollte der beliebige Nullpunkt der inneren Energie u_0 so gewählt werden, dass ein leicht zu reproduzierender Grenzfall erfüllt wird. Die vorliegenden Zustandsgleichungen sind so normiert, dass sie den Grenzfall des vollständig ionisierten, idealen Plasmas bei sehr hohen Temperaturen und niedrigen Dichten erfüllen. Dieser Grenzfall ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$u = \frac{3 N k_B T}{2 m} = \frac{3 k_B T}{2 \rho} (n_e + n_i) = \frac{3 (Z + 1) R T}{2 M_{at}}. \quad (2.7)$$

In dieser Gleichung ist N die Teilchenzahl, k_B die Boltzmannkonstante, Z die Kernladungszahl und M_{at} die molare Masse des atomaren Systems. Die Elektronen- bzw. Ionendichten sind gegeben durch n_e und n_i . Für Wasserstoff mit $Z = 1$ und $M_{at} = 1 \text{ g/mol}$ wird der Grenzfall mit $u_0 = u(10 \text{ MK}) = 249,433 \text{ MJ/g}$ erfüllt.

2.3. Zustandsgleichung von Helium (He-REOS.3)

Die Zustandsgleichung für Helium (He-REOS.3) ist im Gegensatz zur H-REOS.3 aus nur drei Hauptbestandteilen zusammengesetzt, siehe Abbildung 2.8. Da Helium ein Edelgas ist, gibt es unter den hier untersuchten thermodynamischen Bedingungen keine Moleküle. Die Daten der He-REOS.3 für die mittleren und hohen Dichten, bei denen Korrelationen und Entartung eine wichtige Rolle spielen, werden aus DFT-MD-Simulationen gewonnen. Im Bereich niedriger Dichten werden zwei Modelle angeschlossen. Für das partiell und voll ionisierte Plasma bei Temperaturen über 10000 K geht das Modell von Saumon *et al.*²⁸⁴ (SCvH) für die meisten $\rho - T$ -Punkte sehr glatt in die DFT-MD Daten über, siehe Abschnitt 2.3.2. Nur bei Temperaturen zwischen 60 kK und 300 kK muss ein kleiner Bereich interpoliert werden, in dem die Ionisation der Helium-Atome genau im Übergangsbereich zwischen dem DFT-MD und dem SCvH-Bereich auftritt. Für den Bereich des atomaren Heliums bei $T \leq 10$ kK kann mit Hilfe sehr genauer Virialkoeffizienten für das schwach korrelierte System ein sehr glatter und konsistenter Übergang vom idealen Gas zu den DFT-MD-Daten geschaffen werden, siehe Abschnitt 2.3.2. Im folgenden werden die Methoden vorgestellt, mit denen die Daten für die He-REOS.3-Tabelle erzeugt wurden. Die Zusammensetzung der Zustandsgleichung wird dann diskutiert und mit anderen Literaturwerten für Helium verglichen.

2.3.1. DFT-MD-Daten

Die DFT-MD-Daten der He-REOS.3 wurden aus Simulationen von 108 Teilchen (216 Elektronen) mit VASP gewonnen. Die Auswertung der Brillouin-Zone wurde wie bei Wasserstoff am Baldereschi-Punkt¹² vorgenommen. Die Ionentemperatur wurde ebenfalls über den Nosé-Thermostaten²⁴⁸ eingestellt sowie das PBE-Austausch-Korrelationsfunktional²⁵³ genutzt. Der Energie-cutoff für die ebenen Wellen sowie das verwendete Potential variieren mit der Dichte und der Temperatur. Für Dichten $\rho \leq 10$ g/cm³ wurde das PAW-Potential^{25;179} genutzt. Unterhalb von 1 g/cm³ und 10000 K betrug der Cutoff 1300-1400 eV, während bei den gleichen Temperaturen aber Dichten 1 g/cm³ $< \rho \leq 10$ g/cm³ 800 eV ausreicht.

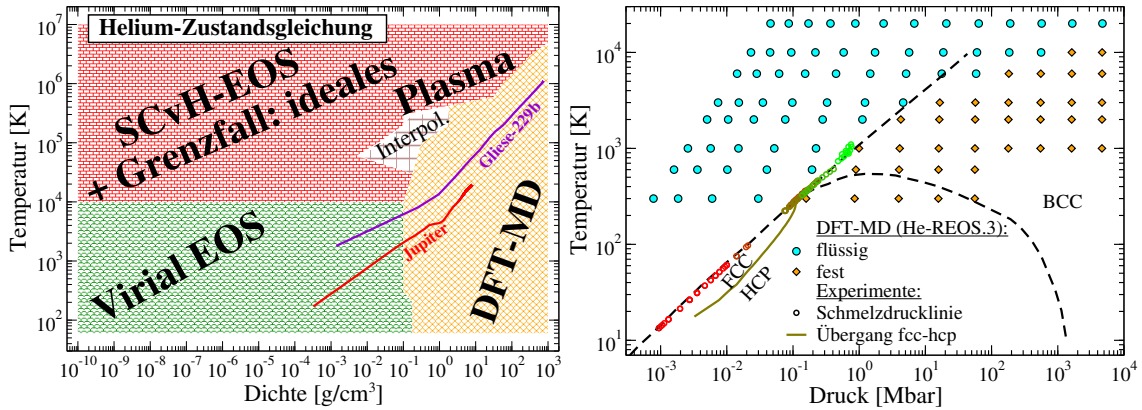


Abbildung 2.8.: Links: Zusammensetzung der He-REOS.3-Zustandsgleichung^{18,[A2]}. Die EOS verbindet DFT-MD-Daten mit der SCvH-Zustandsgleichung²⁸⁴ (rot) und im atomaren Bereich mit einer Virial-EOS (grün), siehe Text. Ein kleiner Bereich des partiell ionisierten Plasmas wird interpoliert (braun). Als Vergleich sind die Isentropen von Jupiter (rot) und Gliese-229b (violett) bezüglich ihrer Helium-Partialdichte in der linearen Mischung abgebildet. Rechts: Das Phasendiagramm für Helium, welches in der Dissertation von Lorenzen¹⁹³ zu finden ist und aus den DFT-MD-Daten der He-REOS.3 gewonnen wurde. Die gestrichelten Phasengrenzen wurden von Loubeyre¹⁹⁸ vorgeschlagen. Von ihm stammen auch die experimentellen Werte für den FCC-HCP-Übergang²⁰². Die offenen Symbole zeigen experimentelle Werte für Schmelzdrucklinie^{62;65;199;220;282;316}.

ten. Dieser Wert wurde auch für alle Temperaturen über 10 kK und alle Dichten $\rho \leq 10 \text{ g}/\text{cm}^3$ genutzt.

Bei sehr hohen Dichten oberhalb von $10 \text{ g}/\text{cm}^3$ musste für alle Temperaturen das Coulombpotential mit einem Cutoff von 10 eV verwendet werden, da die PAW-Potentiale hier wegen der stark überlappenden PAW-Sphären keine konvergierten Ergebnisse mehr liefern. Das Phasendiagramm, dem diese Simulationen zugrunde liegen, wird in der Dissertation von Lorenzen¹⁹³ vorgestellt, der alle DFT-MD-Rechnungen für Helium in der He-REOS.3 durchgeführt hat. In Abbildung 2.8 wird deutlich, dass DFT-MD-Daten für sehr hohe Temperaturen nur bei sehr hohen Dichten verfügbar sind. Der Grund dafür ist, dass gemäß der Fermi-Dirac-Statistik die Elektronen mit steigender Temperatur immer höhere Energiebänder

besetzen, welche in den Simulationen berücksichtigt werden müssen und diese dann sehr aufwändig werden. Die Besetzung höherer Energien kann nur durch hohe Dichten und damit einem größeren chemischen Potential kompensiert werden, sodass DFT-MD-Daten hier nur für hohe Temperaturen verfügbar sind. Andererseits verhält sich das System mit steigender Temperatur und/oder kleinen Dichten immer mehr wie ein ideales Gas. Hier können andere geeignete Zustandsgleichungsmodelle genutzt werden, die im Folgendem vorgestellt werden.

2.3.2. Anschluss zu niedrigen Dichten: Die Virialentwicklung und das partiell ionisierte Plasma

Die Virialzustandsgleichung ist eine Reihenentwicklung des Drucks, welcher in Ideal- (P^{id}) und Korrelationsbeiträge (P^{cor}) zerlegt werden kann, nach Potenzen der Dichte³⁰⁹:

$$P(\varrho, T) = P^{\text{id}} + P^{\text{cor}} = \frac{\varrho RT}{M} \left[1 + \sum_{i=2}^{\infty} B_i(T) \left(\frac{\varrho}{M} \right)^{i-1} \right] . \quad (2.8)$$

Zusätzlich zu den idealen Beitrag $\varrho RT/M$ werden Wechselwirkungsbeiträge durch die Virialkoeffizienten $B_i(T)$ mit berücksichtigt, wobei B_2 die Zwei-Teilchen-Wechselwirkung, B_3 die Drei-Teilchen-Wechselwirkung usw. beschreiben. Unter Ausnutzung des fundamentalen Zusammenhangs zwischen thermischer und kalorischer Zustandsgleichung (Herleitung siehe Abschnitt 2.4)

$$-\varrho^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \varrho} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\varrho - P$$

erhält man dann auch einen Ausdruck für die spezifische innere Energie $u = U/m$:

$$u(\varrho, T) = u^{\text{id}} - \frac{RT^2}{M} \left[\sum_{i=2}^{\infty} \frac{dB_i(T)}{dT} \frac{1}{i-1} \left(\frac{\varrho}{M} \right)^{i-1} \right] . \quad (2.9)$$

Für den besten Übergang vom idealen Gas zu den DFT-MD-Daten wurden verschiedene Datensätze von Virialkoeffizienten untersucht^{24;52;290;291;294}. Davon wurden dann $B_2(T)$ bis $B_5(T)$ von Shaul *et al.*²⁹¹ für Temperaturen unterhalb von 600 K verwendet. Diese $B_i(T)$ wurden aus Monte-Carlo-Rechnungen gewonnen,

welche die entsprechenden N-Teilchen-Beiträge in der Mayerschen Clusterentwicklung auswerten. Die Wechselwirkungen werden bei diesen Rechnungen aus entsprechenden *ab initio*-Paar²⁶¹- und Trimerpotentialen⁵¹ gewonnen^{290;291}. Um die Virialkoeffizienten für die Temperaturen der He-REOS.3 zu erhalten wurden die Originaldaten mit natürlichen kubischen Splines interpoliert. Für $600 \text{ K} \leq T \leq 10 \text{ kK}$ gelingt der glatteste Übergang mit Hilfe von $B_2(T)$ und $B_3(T)$ von Bich *et al.*²⁴. Diese Virialkoeffizienten wurden unter Verwendung eines *ab initio* Wechselwirkungspotentials mit 18 Parametern¹²⁵ berechnet. Die genauen Werte der genutzten Virialkoeffizienten sind in Tabelle 2.1 zu finden.

T [K]	B_2 $\left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}\right]$	B_3 $\left[\frac{\text{cm}^6}{\text{mol}^2}\right]$	B_4 $\left[\frac{\text{cm}^9}{\text{mol}^3}\right]$	B_5 $\left[\frac{\text{cm}^{12}}{\text{mol}^4}\right]$
60 ^a	7,46483	161,676	1553,11	15478,4
100 ^a	10,4982	147,007	1322,62	9857,49
200 ^a	11,6929	121,309	882,001	4458,25
300 ^a	11,5403	104,351	650,567	2547,36
600 ^b	10,651	78,73
1000 ^b	9,5497	59,44
2000 ^b	7,9556	38,60
3000 ^b	7,0330	29,16
6000 ^b	5,5459	17,14
10000 ^b	4,5542	11,05

Tabelle 2.1.: Interpolierte Virialkoeffizienten B_i aus den Originaldaten von Shaul *et al.*²⁹¹ (a) und die Originaldaten von Bich *et al.*²⁴ (b), welche für die He-REOS.3 genutzt wurden.

Die idealen Beiträge in den Gleichungen 2.8 und 2.9 berücksichtigen keine Ionisation der Heliumatome. Deshalb werden in der He-REOS.3 P^{id} und u^{id} aus der freien Energie F eines Modells des idealen Plasmas berechnet, welches an Förster *et al.*⁹⁰ angelehnt ist und im Folgenden beschrieben wird. Die freie Energie ist gegeben durch

$$F = Nk_B T \left[\sum_{z=0}^2 \alpha_z \ln \left(\frac{n_z \lambda_z^3}{\sigma_z} \right) - 1 \right] . \quad (2.10)$$

Dabei steht z für die z -fach geladenen Atome/Ionen welche den relativen An-

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

teil $\alpha_z = n_z/n$ an der Gesamtteildichte $n = N/V = n_0 + n_1 + n_2$ des Systems haben. Die thermische de-Broglie-Wellenlänge der Teilchen ist gegeben durch $\lambda_z = h(2\pi m_z k_B T)^{-1/2}$ und die interne Zustandssumme wird in der Planck-Larkin-Näherung^{185;258} berechnet:

$$\begin{aligned}\sigma_z &= \sum_m g_{z,m} \left[\exp\left(\frac{-E_{z,m}}{k_B T}\right) - 1 + \frac{E_{z,m}}{k_B T} \right] \exp\left(-\sum_{z'=0}^z \frac{I_{z'}}{k_B T}\right), z = 0, 1, \\ \sigma_2 &= \exp\left(-\sum_{z'=0}^2 \frac{I_{z'}}{k_B T}\right).\end{aligned}\quad (2.11)$$

Die Ionisationsenergien I_z , die Energieniveaus $E_{z,m}$ und ihre entsprechenden statistischen Gewichte $g_{z,m}$ wurden der NIST-Datenbank¹⁷⁵ entnommen. An dieser Stelle sei auf den Unterschied zum SCvH-Modell, welches später kurz beschrieben wird, hingewiesen: Im SCvH-Modell werden bei der Berechnung der Zustandssumme nur die I_z berücksichtigt, während die Zwischenniveaus $E_{z,m}$ vernachlässigt werden, sodass es zu kleinen Abweichungen im idealen Bereich kommt, siehe nächster Abschnitt. Die α_z werden über die gekoppelten Saha-Gleichungen²⁷⁹

$$\mu_0 = \mu_1 + \mu_e, \quad \mu_1 = \mu_2 + \mu_e, \quad (2.12)$$

berechnet, welche die Ladungsneutralität $n_e = n_1 + 2n_2$ als Randbedingung erfüllen müssen. P^{id} und u^{id} können dann durch Differentiation der spezifischen freien Energie $f = F/m$ berechnet werden:

$$P = \varrho^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \varrho} \right)_T, \quad u = f - T \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\varrho. \quad (2.13)$$

Die Isothermen des Drucks und der spezifischen inneren Energie der Virialzustandsgleichung sind in Abbildung 2.9 zu sehen. In den beiden oberen Bildern ist der Quotient aus Druck und Dichte über der Dichte aufgetragen. In dieser Darstellung werden ideale Beiträge auf horizontale Geraden (gepunktet) reduziert, sodass Wechselwirkungsbeiträge, welche von der Horizontalen abweichen deutlich hervorgehoben werden. Offensichtlich gehen die DFT-MD Daten (Kreise) für keine Temperatur im Druck und in der inneren Energie direkt in das ideale Gas-Verhalten über. Die Virialzustandsgleichung (durchgezogene Linie mit $\varrho < 0,3 \text{ g/cm}^3$) ermöglicht diesen glatten Übergang. Für Temperaturen $T \leq 300 \text{ K}$ und Dichten

2.3. Zustandsgleichung von Helium (He-REOS.3)

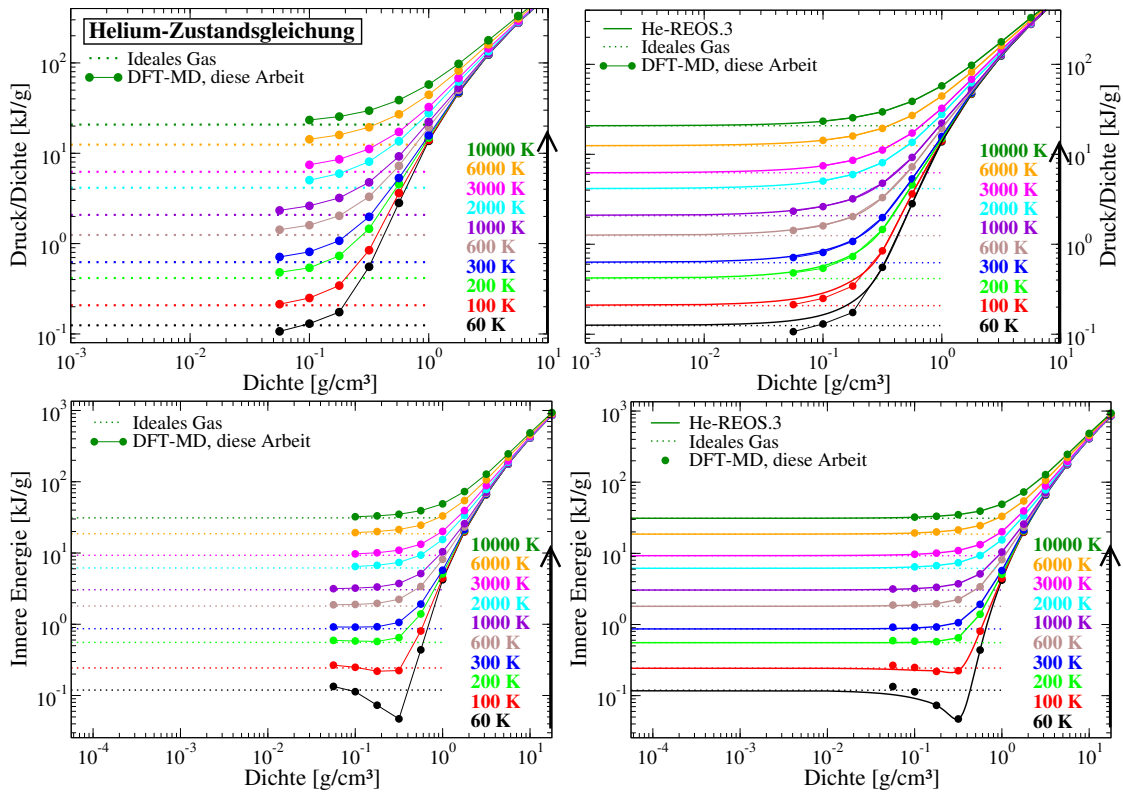


Abbildung 2.9.: Isothermen der He-REOS.3 (durchgezogen) [A2], welche über eine Virialzustandsgleichung konstruiert wurden. Diese schafft einen glatten Übergang vom idealen Gas (gepunktet) zu den DFT-MD Daten (Kreise). Die linken Bilder zeigen das Ausgangsproblem, während die rechten den entsprechenden Verlauf der Virialzustandsgleichung illustrieren.

$\rho \leq 0,2 \text{ g/cm}^3$ sind DFT-MD Simulationen sehr aufwändig, insbesondere weil hier der Übergang zum Festkörper liegt. Dies kann man sehr gut in der inneren Energie bei 60 K an der Senke bei $0,3 \text{ g/cm}^3$ sehen. Um einen glatten Übergang zu gewährleisten, wurden bei den vier kleinsten Isothermen die Virialdaten bis $\sim 0,3 \text{ g/cm}^3$ genutzt. Der Festkörper oberhalb dieser Dichte ist dann wieder gut durch die DFT-MD-Daten beschrieben, was man am Vergleich mit den Experimenten in Kapitel 3 sehen kann.

Bei Temperaturen über 10000 K wird die Ionisation in Helium relevant. Die Beiträge der freien Elektronen führen im Bereich des idealen Gasmodells nun zu nicht mehr horizontalen Isothermen, siehe Abbildung 2.10. Der Übergang vom idealen

Gas zu den DFT-MD-Daten gelingt im Bereich des partiell ionisierten Plasmas (PIP) und des vollständig ionisierten Plasmas am Besten, wenn man das Modell von Saumon *et al.*²⁸⁴ (SCvH-He) nutzt. Um die Zusammensetzung der He-REOS.3 besser zu verstehen, soll im Folgendem kurz auf die wichtigsten Punkte des Modells eingegangen werden. Die freie Energie wird hier geschrieben als:

$$F(n_0, n_1, n_2, n_e, V, T) = F_{\text{id}} + F_{\text{conf}} + F_{\text{DH}} + F_{\text{int}} \quad . \quad (2.14)$$

Die letzten beiden Terme $F_{\text{id}} + F_{\text{int}}$ sind der ideale und interne Beitrag und entsprechen in der Summe Gleichung 2.10, bis auf den Unterschied, dass die elektronische Zustandssumme nur die Ionisationsenergien I_z berücksichtigt und die idealen Beiträge der Elektronen über Fermi-Integrale ausgedrückt sind, um Entartungseffekte zu berücksichtigen. Der Beitrag der wechselwirkenden Heliumatome F_{conf} wird mittels Fluid Perturbation Theory berechnet und die Wechselwirkungsbeiträge der geladenen Teilchen über die Debye-Hückel-Näherung F_{DH} . Für Dichten $> 3 \text{ g/cm}^3$ wird Helium als vollständig ionisiert angenommen und durch das abgeschirmte Ein-Komponenten-Plasma⁵³ (SOCP) beschrieben. Damit die He-REOS.3 Tabelle für jede Isotherme die gleiche Anzahl an Dichtepunkten hat, wurden die Daten des SCvH-He-Modells mit dem Modell des idealen Plasmas zu Dichten von 10^{-10} g/cm^3 erweitert, was den kleinsten Dichten in der Virialzustandsgleichung entspricht. Deshalb heißt das rote Gebiet in Abbildung 2.8 “SCvH-EOS + Grenzfall: ideales Plasma”. Wie auch bei Wasserstoff wird die Verbindung des partiell ionisierten Plasmas zu den DFT-MD-Daten am schwierigsten, wenn eine deutliche Ionisation von Helium genau im Übergangsbereich an der linken Flanke der DFT-MD-Region auftritt. Dies passiert bei Helium für Temperaturen zwischen 60 kK und 300 kK, sodass bei diesen Isothermen wieder kubische Splineinterpolation angewendet wurde, um einen glatten Übergang zu schaffen.

Sämtliche Isothermen der He-REOS.3 sind in Abbildung 2.10 zu sehen (durchgezogene Linien) zusammen mit dem verwendeten Modell des idealen Gases (gepunktet), den SCvH-He-Daten (gestrichelt) und *ab initio*-Daten von Militzer²¹⁶ (Dreiecke), welche aus DFT-MD- und PIMC-Rechnungen gewonnen wurden. Für Temperaturen $T < 1000 \text{ K}$ liegen die SCvH-He Daten für den Druck und die innere Energie im nicht-idealen Bereich deutlich über denen der He-REOS.3, während sie für 10 kK im Bereich des SOCP ($\rho > 3 \text{ g/cm}^3$) den Druck unterschätzen und

2.3. Zustandsgleichung von Helium (He-REOS.3)

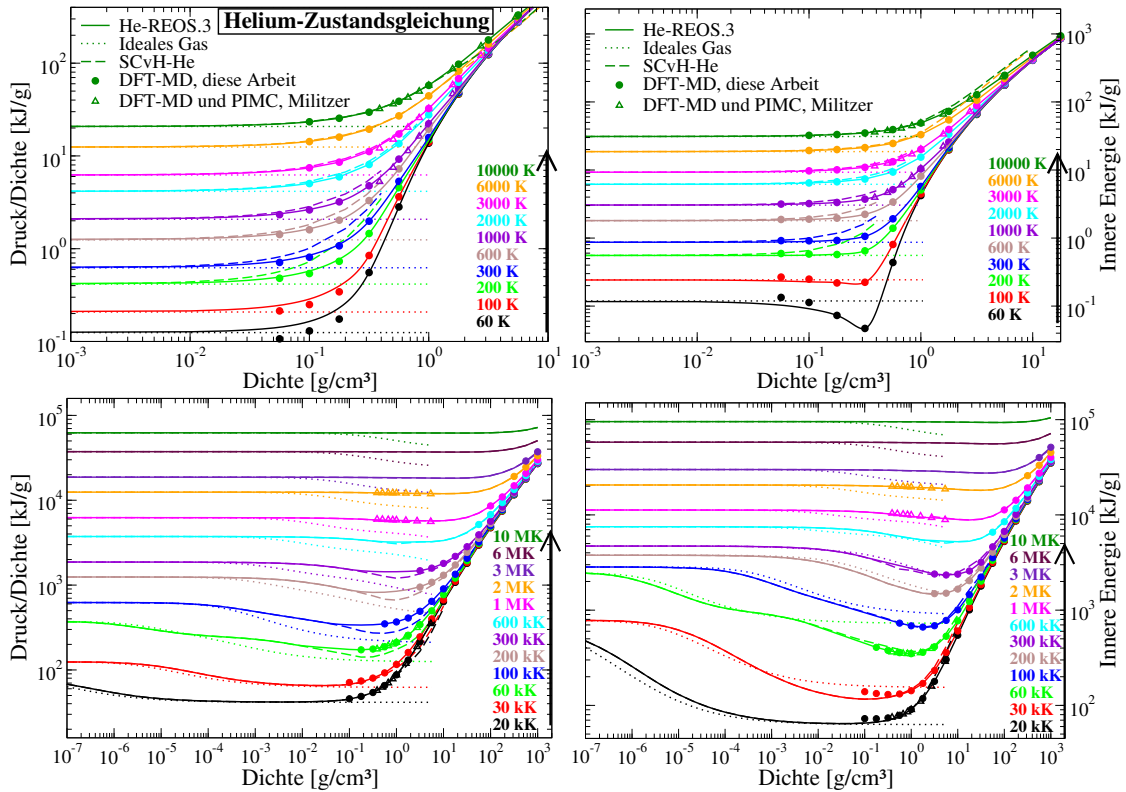


Abbildung 2.10.: Isothermen der He-REOS.3 (durchgezogen) für Temperaturen $T \leq 10000$ K (oben) und oberhalb von 10000 K (unten) [A2]. Als Vergleich sind das ideale Gas Modell (gepunktet) das SCvH-He-Modell²⁸⁴ (gestrichelt) sowie DFT-MD-Daten aus dieser Arbeit (Kreise) und DFT-MD und PIMC-Daten von Militzer²¹⁶ mit eingezeichnet.

die innere Energie überschätzen. Für $T \geq 60$ kK ist der Interpolationsbereich zwischen DFT-MD und SCvH-He sehr gut dort zu erkennen, wo die gestrichelten Linien von den durchgezogenen abweichen und noch keine Kreise (DFT-MD-Daten) auf den durchgezogenen liegen. Das Modell des idealen Gases (IGM) weicht im idealen Bereich bei kleinen Dichten etwas von den SCvH-He Daten ab, was an der schon erwähnten Berücksichtigung von Energieniveaus angeregter Zustände liegt. Das IGM beinhaltet per Definition keine Teilchenwechselwirkung, sodass für hohe Dichten, bei denen es eigentlich zu Druckionisation kommt, ein atomares System vorhergesagt wird. Die hohe Dichte führt auf eine größere Rekombinationswahrscheinlichkeit in der Saha-Gleichung hin zum atomaren System. Dies sieht man

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

an den abfallenden Isothermen des IGM bei steigendem ρ . Ganz deutlich wird das bei der 10 MK-Isotherme der He-REOS.3 (durchgezogene Kurve), welche nahezu komplett horizontal verläuft und sich damit wie ein ideales Gas verhält, während das IGM (gepunktete Kurve) hier bei hohen Dichten abweicht.

Beim Vergleich der He-REOS.3 mit den *ab initio*-Daten von Militzer²¹⁶ sieht man, dass diese vor allem in der inneren Energie überall sehr gut übereinstimmen und beim Druck nur bei den kleinsten Dichten und den niedrigsten Temperaturen etwas voneinander abweichen. Das liegt an den unterschiedlichen Teilchenzahlen in den Simulationen (Militzer: 64, DFT-MD in He-REOS.3: 108), welche insbesondere in diesem Bereich ein unterschiedliches Konvergenzverhalten zeigen.

Abschließend sei hier noch erwähnt, dass die Heliumzustandsgleichung so normiert ist, dass der Grenzfall des vollständig ionisierten, idealen Plasmas (siehe Abschnitt 2.2) mit $u_0 = u(10 \text{ MK}) = 93,538 \text{ MJ/g}$ erfüllt ist. Bei diesem Ergebnis wurden in Gleichung 2.7 $Z = 2$ und $M_{at} = 4 \text{ g/mol}$ verwendet.

ρ [g/cm ³]	T [K]	P [GPa]	u [kJ/g]
$1,0000 \cdot 10^{-10}$	$6,0000 \cdot 10^1$	$1,2463 \cdot 10^{-11}$	$-1,8429 \cdot 10^3$
⋮	⋮	⋮	⋮
$1,0000 \cdot 10^3$	$6,0000 \cdot 10^1$	$2,6941 \cdot 10^7$	$3,2974 \cdot 10^4$
$1,0000 \cdot 10^{-10}$	$1,0000 \cdot 10^2$	$2,0773 \cdot 10^{-11}$	$-1,8428 \cdot 10^3$
⋮	⋮	⋮	⋮
$1,0000 \cdot 10^3$	$1,0000 \cdot 10^2$	$2,6941 \cdot 10^7$	$3,2974 \cdot 10^4$
⋮	⋮	⋮	⋮
$1,0000 \cdot 10^{-10}$	$1,0000 \cdot 10^7$	$6,2318 \cdot 10^{-6}$	$9,3538 \cdot 10^4$
⋮	⋮	⋮	⋮
$1,0000 \cdot 10^3$	$1,0000 \cdot 10^7$	$7,1984 \cdot 10^8$	$1,0273 \cdot 10^5$

Abbildung 2.11.: Beispieltabelle für die He-REOS.3 [A2].

2.4. Thermodynamische Konsistenz

Aus der Thermodynamik ist der fundamentale Zusammenhang zwischen der kalorischen und thermischen Zustandsgleichung bekannt:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P \quad \begin{matrix} \rho = \frac{m}{V} \\ u = \frac{U}{m} \end{matrix} \quad -\rho^2 \left(\frac{\partial u}{\partial \rho}\right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho - P \quad . \quad (2.15)$$

Dieser wurde auch schon bei der Virialzustandsgleichung für Helium im vorherigen Abschnitt benutzt. Man kann ihn aus der Gibbs'schen Fundamentalgleichung verbunden mit dem totalen Differential der inneren Energie dU und der Entropie dS herleiten:

$$\begin{aligned} dS &= \frac{1}{T}dU + \frac{P}{T}dV = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V dT + \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T + P \right] dV \\ &= \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V dT \quad . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Aus der Integrabilitätsbedingung für die Entropie $\frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V} = \frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T}$ folgt dann Gleichung 2.15. Dividiert man diese Gleichung durch P , so erhält man einen Ausdruck für die relative Abweichung/Verletzung der thermodynamischen Konsistenz:

$$\frac{T}{P} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho + \frac{\rho^2}{P} \left(\frac{\partial u}{\partial \rho}\right)_T - 1 = \Delta \quad . \quad (2.17)$$

Zum Beispiel kennzeichnet $\Delta = 0$ eine perfekte thermodynamische Konsistenz, während $\Delta = 0,1$ eine Verletzung von Gleichung 2.15 um 10 % bedeutet. Für das ideale Gas, dessen kalorische Zustandsgleichung unabhängig von der Dichte ist ($u = \frac{3RT}{2M}$) und dessen Druck linear von der Temperatur abhängt ($P = \rho RT/M$) ergibt sich $\Delta = 0$. Allgemein müssen also die nicht-idealen Beiträge zur inneren Energie durch die Änderung der nicht-idealen Druckbeiträge mit der Temperatur kompensiert werden. Um die Ableitungen in Gleichung 2.17 in der Umgebung der Datenpunkte numerisch auswerten zu können, müssen die tabellarischen Zustandsgleichungen interpoliert werden. Da das Dichtegitter sehr eng ist, werden hier natürliche kubische Splines genutzt. Diese Methode neigt zum Überschwingen, wenn die Datenpunkte zu weit auseinanderliegen, was bei dem Temperaturgitter der Fall ist (1 kK, 2 kK, 3 kK, 6 kK, 10 kK, 20 kK, ...). Hier wird auf die

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

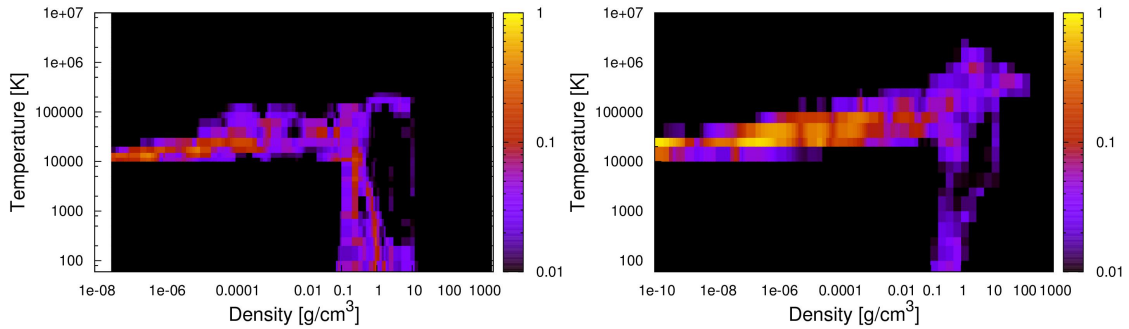


Abbildung 2.12.: Thermodynamische Konsistenz der H-REOS.3 (linkes Bild) und der He-REOS.3 (rechtes Bild) [A2]. In schwarzen Bereichen beträgt die Abweichung Δ in Gleichung 2.17 weniger als 1 %, in roten Bereichen ~ 10 % und in gelben Bereichen ~ 100 %.

Splineinterpolation nach Akima⁴ zurückgegriffen, welche keine Stetigkeitsbedingung an die zweite Ableitung der Originaldaten stellt und somit nur wenig überschwingt. Die Ergebnisse für die thermodynamische Konsistenz der Wasserstoff- und Heliumzustandsgleichung sind in Abbildung 2.12 zu sehen. In schwarzen Bereichen beträgt die Abweichung Δ in Gleichung 2.17 weniger als 1 %, in roten Bereichen ~ 10 %. Sowohl für die H-REOS.3 (linkes Bild) als auch für die He-REOS.3 (rechtes Bild) gilt $\Delta \leq 5\%$ (meistens sogar $\Delta \leq 1\%$) in den Bereichen, die für das Innere Brauner Zwerge und Großer Planeten relevant sind, siehe Isentropen in Abbildung 2.4 und 2.8. In beiden Zustandsgleichungen sind die Bereiche mit der scheinbar stärksten Verletzung der Konsistenz im Bereich des idealen Gases bei niedrigen Dichten und Temperaturen zwischen 10 kK und 50 kK. Hier ionisieren Wasserstoff und Helium, was zu einem Anstieg in den Isothermen des Drucks und der spezifischen inneren Energie führt, siehe Abbildung 2.10. Dieser Anstieg hat einen starken Einfluss auf die Interpolation der Isochoren, welche stets die zwei benachbarten Punkte berücksichtigt, und damit auch auf die sehr empfindliche Ableitung $(\partial P/\partial T)_\rho$. Der Term muss nun $(\partial u/\partial \rho)_T$ in Gleichung 2.17 kompensieren, der aber im idealen Gas verschwindet. Das wird jedoch wegen der Interpolationen nie ganz gelingen, sodass die roten und gelben Gebiete im Bereich

des idealen Gases intrinsisch in unserem Konsistenzkriterium und dessen Implementierung liegen und damit nur scheinbare Inkonsistenzen sind. Diese spielen jedoch für die Berechnung von Isentropen für Braune Zwerge und Große Planeten keine Rolle. Bemerkenswerterweise treten diese Inkonsistenzen nicht beim Übergang vom SCvH-H Modell in das Chabrier-Potekhin Modell in der H-REOS.3 auf, siehe Abbildung 2.4 und die entsprechenden schwarzen Bereiche in Abbildung 2.12. Wasserstoff ist hier schon vollständig ionisiert, sodass die benachbarten Isothermen sich nicht mehr stark im Anstieg im Bereich des idealen Gases unterscheiden.

2.5. Zustandsgleichung einer linearen Mischung von Wasserstoff und Helium

Braune Zwerge und Große Planeten bestehen hauptsächlich aus Wasserstoff und Helium und einem kleinen Anteil von schwereren Elementen. Für die Berechnung des inneren Aufbaus benötigt man also eine Mischungszustandsgleichung aus diesen Bestandteilen. Die lineare Mischung (LM-REOS.3) aus der H-REOS.3 und He-REOS.3 zu einem vorgegebenen Massenanteil an Helium (Y) und Wasserstoff ($X = 1 - Y$) erfolgt bei konstantem Druck zu gegebener Temperatur:

$$\frac{1}{\rho_{mix}(P, T)} = \frac{X}{\rho_H(P, T)} + \frac{Y}{\rho_{He}(P, T)}, \quad (2.18)$$

$$u_{mix}(P, T) = Xu_H(P, T) + Yu_{He}(P, T). \quad (2.19)$$

Nimmt man noch eine repräsentative Zustandsgleichung für die schwereren Elemente (Z), wie z.B. Wasser für die Großen Planeten oder eine skalierte Helium-EOS für Braune Zwerge (siehe Kapitel 4), so muss noch der Term $Z/\rho_Z(P, T)$ auf der rechten Seite von Gleichung 2.18 addiert werden und $Zu_Z(P, T)$ zu Gleichung 2.19. Für den Wasserstoffanteil ergibt sich dann $X = 1 - Y - Z$. Die lineare Mischungszustandsgleichung kann für jede beliebige Zusammensetzung $X/Y/Z$ aus den einzelnen Zustandsgleichungen berechnet werden.

Alternativ kann man aber auch *ab initio*-Simulationen für eine Mischung aus Wasserstoff, Helium (und evtl. schwereren Elementen) mit der gewünschten Zusammensetzung $X/Y/Z$ durchführen^{195;217;218;227;231}. Dies führt auf die reale Mischungszustandsgleichung (RM-EOS), welche per Definition nichtlineare

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

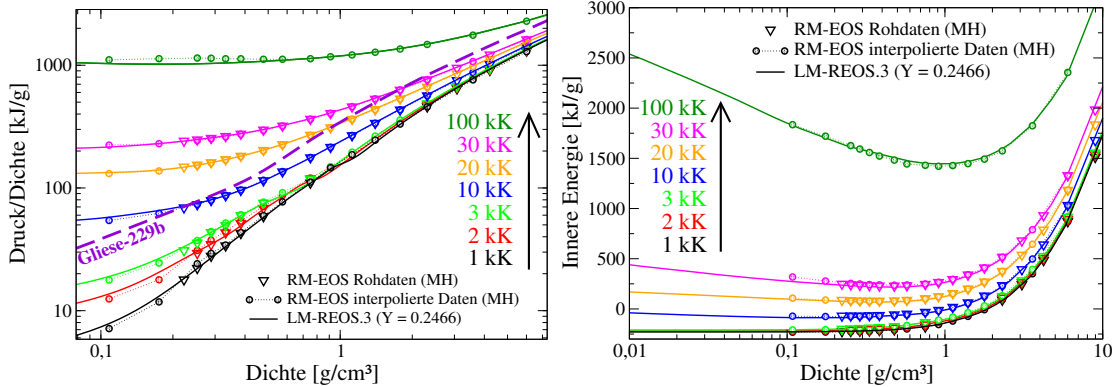


Abbildung 2.13.: Lineare Mischung (LM: durchgezogene Linien) und reale Mischung (RM) aus Wasserstoff und Helium mit $Y = 0,2466$ [A2]. Die Dreiecke zeigen die DFT-MD-Daten von Militzer und Hubbard^{217;218} (MH) und die Kreise ihre daraus interpolierte Zustandsgleichung. Die violett gestrichelte Kurve im linken Bild zeigt die Isentrope von dem Braunen Zwerg Gliese-229b, siehe Abschnitt 4.3.

Mischungseffekte enthält. Solch eine RM-EOS wurde von Militzer^{217;218} für $Y = 0,2466$ berechnet. Die Isothermen für den Druck und die innere Energie ihrer Originaldaten (Dreiecke) und der daraus interpolierten Zustandsgleichung (Kreise) sind in Abbildung 2.13 zusammen mit den entsprechenden Isothermen der LM-REOS.3 zu sehen. Bei den Originaldaten der realen Mischung sind alle Dichten $\rho < 0,2 \text{ g/cm}^3$ und die 100 kK-Isotherme extrapolierte Daten. Der Bereich des Phasenübergangs erster Ordnung in Wasserstoff (vom molekularen, nicht-leitenden zum atomaren leitenden Fluid, siehe Abschnitt 3.5), wie er von Lorenzen *et al.*¹⁹⁶ und Morales *et al.*²³⁰ bei einer Dichte um 1 g/cm^3 und unter 2000 K vorhergesagt wurde, wird in den Originaldaten ausgespart. Die natürliche bikubische Splineinterpolation führt wie vorher schon angedeutet zu den Überschwingern in den interpolierten Daten der realen Mischung.

Dennoch kann man eine bemerkenswerte Übereinstimmung der LM-REOS.3 mit den RM-Originaldaten konstatieren, insbesondere für Temperaturen über 10000 K, welche für Braune Zwerge relevant sind, siehe Abbildung 2.13. Als Vergleich ist im linken Bild die Isentrope von Gliese-229b eingezeichnet (violett gestrichelt). Aus dieser Abbildung kann man schlussfolgern, dass nicht-lineare Mischungseffekte bei

der repräsentativen Konzentration $Y \sim 0,25$ für das Innere von Braunen Zwergen nicht relevant sind, sodass die Verwendung von LM-REOS.3 in Kapitel 4 unter diesem Aspekt gerechtfertigt ist. Trotzdem könnten diese Effekte einen Einfluss auf das Innere von Großen Planeten wie Jupiter haben, wie Militzer und Hubbard²¹⁸ ausführen, siehe Kapitel 4.

Ein weiterer wichtiger Effekt in realen H-He-Mischungen ist die Entmischung beider Komponenten unter hohem Druck, verursacht durch die Metallisierung des Wasserstoff-Subsystems¹⁹⁷. Diese Entmischung wird bereits seit Jahrzehnten untersucht^{197;227;302}, da sie Auswirkungen auf das Innere von Großen Planeten mit kühler Oberfläche wie z.B. Saturn^{91;301} und vielleicht auch Jupiter²⁴⁴ haben. Durch die Entmischung fallen Heliumtropfen aufgrund der höheren Dichte ins Innere des Planeten und geben dabei Gravitationsenergie frei, welche zusätzlich über die Oberfläche abgestrahlt werden muss. Dieser Prozess kann das Problem des Alters von Saturn erklären⁹². Modelle einer homogenen Evolution von Saturn, errechnen ein Alter von $\sim 2,5$ Milliarden Jahren^{92;119;241;247}, was im Widerspruch zum Alter des Sonnensystems von 4,56 Mrd Jahren steht. Diese Rechnungen berücksichtigen das reine Auskühlen ohne eine zusätzliche Energiequelle wie Wärme aus Kernzerfällen oder die Gravitationsenergie der Heliumtröpfchen. Zieht man letztere Energiequelle mit in Betracht, verlängert sich das berechnete Alter von Saturn um eine bis vier Milliarden Jahren²⁶², je nachdem welches Entmischungsphasendiagramm^{197;227;256} man zugrunde legt. Eine alternative Erklärung für dieses Problem finden Leconte und Chabrier¹⁸⁶ durch Einführung von doppelt diffusiven Schichten in Saturn, die eine effektive Kühlung verhindern und somit das Abkühlverhalten verlangsamen.

An dieser Stelle soll auch die Frage beantwortet werden, für welche Objekte und insbesondere ob für Braune Zwerge die Entmischung von Wasserstoff und Helium eine Rolle spielt. Derzeit gibt es zwei Entmischungsphasendiagramme für eine solare Heliumkonzentration, die auf *ab initio*-Simulationen mit dem PBE-XC-Funktional beruhen^{197;227}. Diese sind in Abbildung 2.14 zu sehen. Für $P - T$ -Zustände innerhalb der orangenen Region (Vorhersage von Lorenzen *et al.*¹⁹⁷) und unterhalb der roten Linie (Morales *et al.*²²⁷) entmischt das H-He-Gemisch in eine Helium-arme und eine Helium-reiche Region. Der Hauptunterschied der beiden Vorhersagen ist die Verwendung der idealen Mischungsentropie bei Lorenzen statt

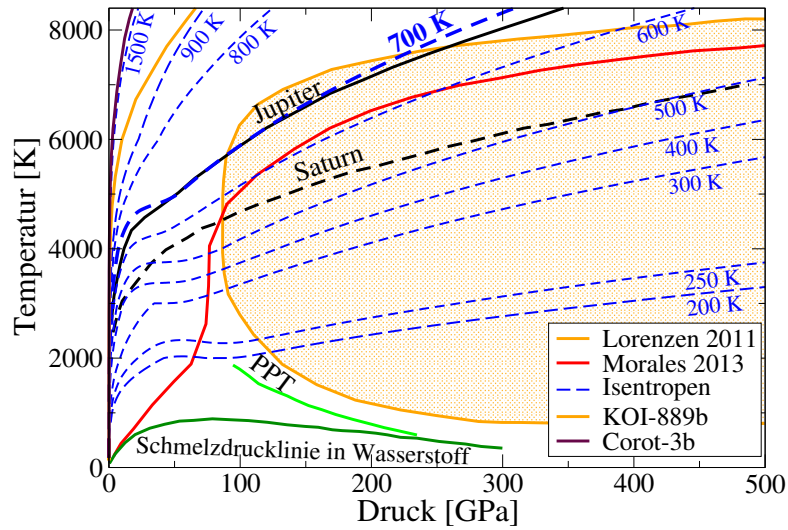


Abbildung 2.14.: Entmischungsphasendiagramm einer H-He-Mischung mit solarem Heliumgehalt. Für $P - T$ -Zustände innerhalb der orangenen Region (Vorhersage von Lorenzen *et al.*¹⁹⁷) und unterhalb der roten Linie (Morales *et al.*²²⁷) entmischt das H-He-System. Die Schmelzdrucklinie und die Koexistenzlinie des Plasmaphasenübergangs (siehe Kapitel 3) sind ebenfalls zu sehen, sowie die Isentropen des massereichen Großen Planeten KOI-889b ($9,98 M_{\text{Jup}}$) und des Braunen Zwergs Corot-3b ($21,66 M_{\text{Jup}}$). Die blauen Linien sind Isentropen für verschiedene 100 bar-Temperaturen.

der realen Mischungsentropie, welche Morales über thermodynamische Integration^{165;233;305} berechnet hat. Offensichtlich befindet sich Saturn innerhalb beider Vorhersagen und Jupiter könnte ebenfalls betroffen sein. Jedoch sind der massereiche Große Planet KOI-889b ($9,98 M_{\text{Jup}}$: orange Kurve) und der Braune Zwerg Corot-3b ($21,66 M_{\text{Jup}}$: braune Linie), welche in Kapitel 4 und 5 näher untersucht werden, weit von der Entmischungsregion entfernt, selbst wenn diese noch um 500 K nach oben verschoben wird wie aktuelle Experimente nahe legen würden³⁸. Die blauen Kurven sind LM-REOS.3-Isentropen mit solarem Heliumgehalt für verschiedene 100-bar-Niveaus von 200 K bis 1500 K. Alle Kurven mit $T \leq 700$ K schneiden zumindest den Entmischungsbereich. Da es für Planeten gebräuchlicher ist das 1-bar-Niveau anzugeben, ist die entsprechende Übersetzung, dass alle Objekte, deren Isentrope $T(1 \text{ bar}) \leq 170$ K erfüllt, von der Entmischung betroffen sind. Berechnet man nun die entsprechenden Masse-Radius-Relationen (siehe Ka-

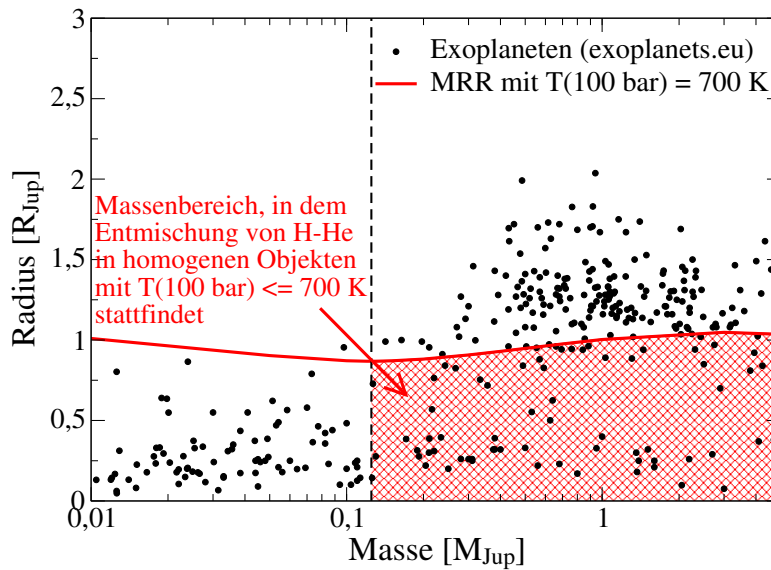


Abbildung 2.15.: Masse-Radius-Diagramm von Exoplaneten mit bekannter Masse und Radius² (Kreise) sowie einer theoretischen Masse-Radius-Relation aus der LM-REOS.3 mit solarem Heliumgehalt für homogene H-He-Planeten deren Isentrope die Bedingung $T(100 \text{ bar}) = 700 \text{ K}$ erfüllt.

pitel 4) und untersucht, ob im Inneren eines Objekt Drücke von $P > 1 \text{ Mbar}$ erreicht werden, ergibt sich folgende Schlussfolgerung: Sofern ein Planet/Brauner Zwerg existiert, dessen Inneres homogen und isentrop und aus einer solaren H-He-Mischung besteht, und der bei 100 bar kühler als 700 K ist sowie eine Masse von mehr als $0,125 M_{\text{Jup}}$ hat, ist dieser von der Entmischung betroffen. Diese Objekte würden in der roten Region in Abbildung 2.15 liegen. Die realen Exoplaneten² (schwarze Kreise) im Bild erfüllen nicht unbedingt die eben genannten Bedingungen.

2.6. Zusammenfassung von Kapitel 2

In diesem Kapitel wurden Zustandsgleichungen für Wasserstoff (H-REOS.3) und Helium (He-REOS.3) vorgestellt, die den Dichte- und Temperaturbereich Großer Planeten und Brauner Zwerge abdecken [A2]. Diese Zustandsgleichungen beinhalten einen großen Satz aus DFT-MD-Daten zur Beschreibung der warmen dichten

2. Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium

Materie. Die Daten wurden in den Bereich schwach korrelierter Systeme und des idealen Gases, sowie zum vollständig ionisierten Plasmas durch geeignete EOS-Modelle erweitert. Dabei wird die thermodynamische Konsistenz dieser Zustandsgleichungen maximal um 5% verletzt in dem Bereich, der für die Isentropen Großer Planeten und Brauner Zwerge relevant ist. Zur Modellierung dieser Objekte benötigt man eine Mischungszustandsgleichung, welche in Form der linearen Mischung eingeführt wurde. Für Braune Zwerge konnte ebenfalls gezeigt werden, dass reale Mischungseffekte auf die Zustandsgleichung keine Rolle spielen und diese Objekte wegen ihrer hohen Außentemperatur in der Regel auch keiner H-He-Entmischung unterliegen.

3. Hochdruckexperimente

In diesem Kapitel werden die Zustandsgleichungen H-REOS.3 und He-REOS.3 gegen Ergebnisse aus Hochdruckexperimenten getestet (Abschnitt 3.1, 3.2 und 3.3), und genutzt, um aktuelle Experimente auszuwerten und zu interpretieren, siehe Abschnitte 3.3, 3.4 und 3.5.

3.1. Statische Diamantstempelzellen

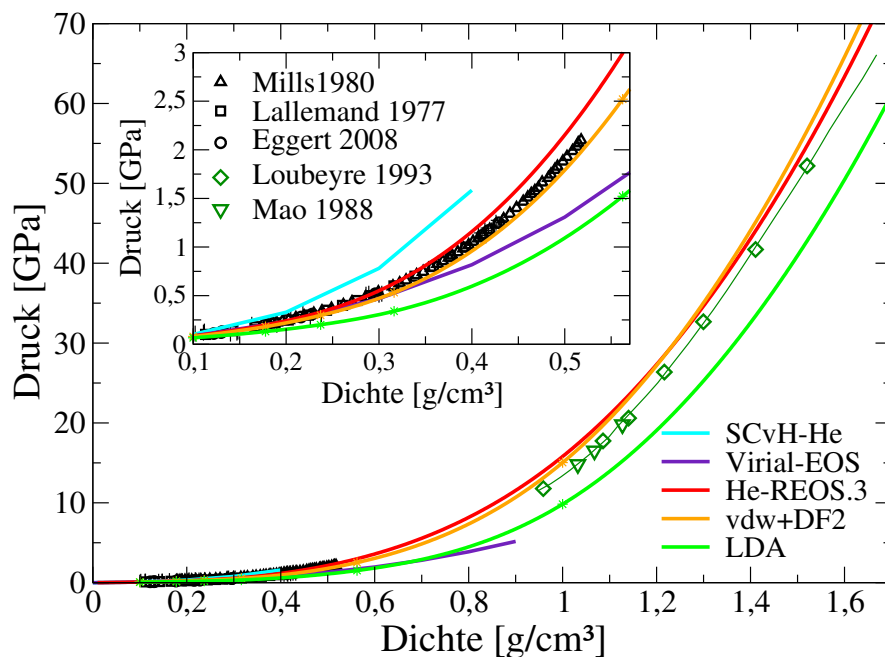


Abbildung 3.1.: 300 K-Isotherme der He-REOS.3 (rote Kurve) zusammen mit anderen theoretischen Vorhersagen (siehe Text) und experimentellen Resultaten^{83;183;202;207;220}.

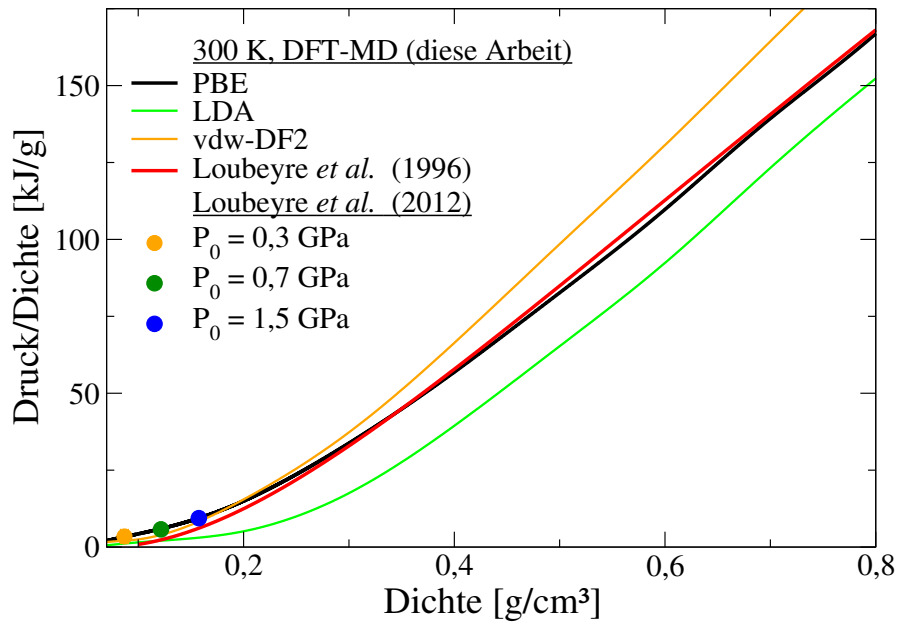


Abbildung 3.2.: 300 K-Isotherme der H-REOS.3 zusammen mit den Ergebnissen zweier Experimente von Loubeyre *et al.*^{200;201}.

Hohe Drücke können in statischen Experimenten durch Kompression der Probe mittels Pressen aus harten Materialien erzeugt werden. Beispielsweise hat Mills²²⁰ bereits 1980 Helium in einem Wolframcarbid-Kolben auf 20 kbar komprimiert. Weitaus höhere Drücke erreicht man mit Diamantstempelzellen, in denen die Probe zwischen den Spitzen zweier Diamanten komprimiert wird. Hier können Drücke bis zu 2,5-4 Mbar erzeugt werden, dann schmilzt oder bricht der Diamant an der Grenzfläche. Mit einer sehr neuen Technik (engl. dDAC: dynamic Diamond Anvil Cell), in der man zwischen die ersten Diamantstempel noch zwei weitere kleinere Stempel aus nanokristallinem Diamant ($\varnothing = 12 - 20 \mu m$) bringt und die Probe ($\varnothing = 3 - 4 \mu m$) darin einsperrt, wurden Drücke über 6 Mbar gemessen⁷⁵. Im folgenden soll sich jedoch auf die Experimente mit einem Stempelpaar konzentriert werden.

Diese Experimente können die volle thermische Zustandsgleichung $P(\varrho, T)$ messen. Zum einen ist aus dem bekannten Anfangsvolumen und der Masse der Probe die Anfangsdichte bekannt. Misst man dann mittels Röntgenstrahlung das komprimierte Volumen (bei Festkörpern z.B. über die Gitterkonstante) lässt sich auch die neue Dichte bestimmen. Der Druck des Systems wird über ein Referenzmaterial in

der Probe (in der Regel Rubin oder Gold) und dessen bekannte, druckgetriebene Spektrallinienverschiebung ermittelt. Die Temperatur ist meistens die Raumtemperatur^{83;200;201}, jedoch kann über einen Absorber innerhalb der Probe diese durch Laser geheizt werden, sodass man auch wenige 1000 K erreichen kann⁷⁷. Deshalb eignen sich Diamantstempelexperimente hervorragend, um die 300 K-Isothermen der H-REOS.3 und He-REOS.3 zu verifizieren. Diese sogenannten Coldcurves sind in den Abbildungen 3.2 und 3.1 zu sehen. Im Fall von Wasserstoff kann man eine sehr gute Übereinstimmung der H-REOS.3 (schwarze Kurve) mit den Experimenten von Loubeyre *et al.*^{200;201} sehen. Diese Experimente sind im Festkörper, dessen zusätzlicher Phononendruck in den DFT-MD-Daten der H-REOS.3 nicht berücksichtigt wird. Während die Experimente von 1996 den Bereich niedriger Dichten unterschätzen, liegen die von 2012 genau auf der theoretischen PBE-300 K-Isotherme (schwarz). Ergebnisse unter Verwendung anderer XC-Funktional unterschätzen den Druck im Falle der LDA (grün) deutlich oder zeigen erst eine Unterschätzung bei kleinen Dichten und dann zu hohe Drücke mit steigender Dichte wie das vdW-DF2-Funktional (orange), sodass das PBE-XC-Funktional für 300 K offensichtlich die beste Wahl ist.

Im Falle der He-REOS.3 ist die Auswertung komplexer. in Abbildung 3.1 sind neben der 300 K-Isotherme (rot: He-REOS.3) auch die der SCvH-EOS²⁸⁴ (cyan), die Virialzustandsgleichung (violet: siehe Kapitel 2.3.2) und weitere DFT-MD-Kurven mit anderen XC-Funktionalen als PBE (He-REOS.3) zu sehen: das van-der-Waals XC-Funktional vdW-DF2 (orange: Berücksichtigung von Dispersionskräften, siehe Abschnitt 3.5) und die einfache lokale Dichtenäherung LDA (grün). Während die H-REOS.3 sehr gut mit den experimentellen Daten in der Flüssigkeit (schwarze Dreiecke²²⁰, schwarze Kreise⁸³) und im Gas (Quadrate¹⁸³) übereinstimmt, überschätzt sie den Druck im Festkörper (grüne Diamanten²⁰², grüne Dreiecke²⁰⁷), trotz fehlender Phononenbeiträge systematisch, mit einer maximalen Abweichung von 10% bei 1,5 g/cm³. Auch die Wahl anderer XC-Funktionale führt zu keiner Verbesserung. Das vdW-DF2 unterschätzt die Experimente bei niedriger Dichte ein wenig und überschätzt den Festkörper, während die LDA-Kurve erwartungsgemäß den Druck deutlich unterschätzt. Ebenfalls zu erwarten ist, dass die Virial-EOS den Druck bei höheren Dichten unterschätzt. Die SCvH-EOS jedoch überschätzt den Druck am stärksten, was sich in Kapitel 2 schon für 300 K andeutete.

3.2. Hugoniotexperimente

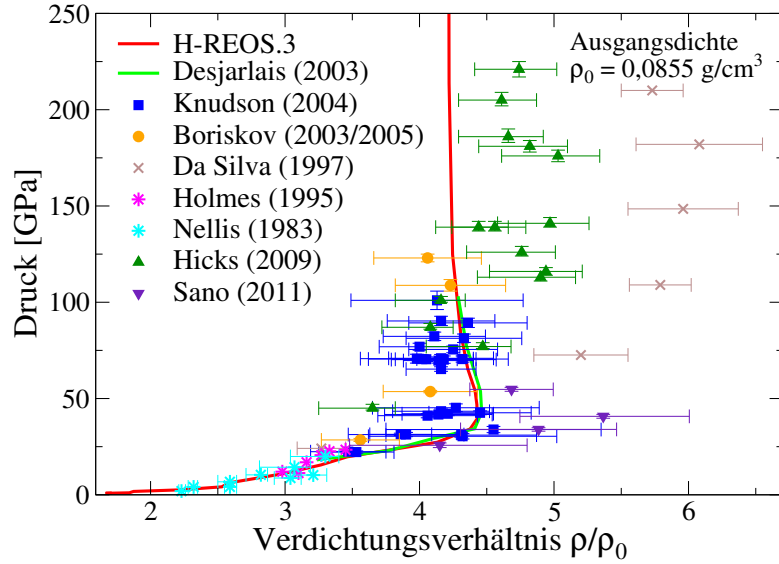


Abbildung 3.3.: Hugoniotkurve aus der H-REOS.3 (schwarz, durchgezogen) zusammen mit der Vorhersage von Desjarlais⁶⁹ und experimentellen Ergebnissen unter Nutzung verschiedener Treiber (siehe Text)^{28;30;64;133;136;169;237;281}.

Eine andere Möglichkeit hohe Drücke bei hohen Temperaturen zu erzeugen sind dynamische Stoßwellenexperimente wie beispielsweise Hugoniotexperimente. Hier induziert ein möglichst planarer Pusher eine ebenfalls planare Stoßwelle in der Probe, welche dann das Material in einer Säule komprimiert. Aufgrund der Stoßgeometrie kann man aus Massen-, Impuls- und Energieerhaltung die sogenannten Rankine-Hugoniot-Gleichungen⁷⁶ ableiten:

$$\eta = \frac{\varrho_1}{\varrho_0} = \frac{u_s}{u_s - u_p}, \quad (3.1)$$

$$P_1 - P_0 = \varrho_0 u_s u_p, \quad (3.2)$$

$$u_1 - u_0 = \frac{1}{2}(P_1 + P_0) \left(\frac{1}{\varrho_0} - \frac{1}{\varrho_1} \right). \quad (3.3)$$

Das Kompressionsverhältnis $\eta = \varrho_1/\varrho_0$ mit der Anfangsdichte ϱ_0 ist gegeben aus dem Verhältnis von der gemessenen Pushergeschwindigkeit u_p und Schockwellengeschwindigkeit u_s , während bei bekanntem Anfangsdruck P_0 der erreichte Druck P_1 über die zweite Gleichung bestimmt werden kann. Für den Vergleich des Experiments mit Vorhersagen theoretischer Zustandsgleichungen (Druck: $P(\varrho, T)$,

spezifische innere Energie $u(\rho, T)$) ist die dritte Gleichung von besonderem Interesse. Zu den bekannten Anfangsbedingungen des Experiments (P_0, ρ_0, T_0, u_0) kann jeder beliebige Endzustand, welcher diese Gleichung erfüllen muss, berechnet werden. Insbesondere kann so das maximale Kompressionsverhältnis für ein Material bestimmt werden. Die Hugoniotkurve für Wasserstoff, welche von $T_0 \sim 20$ K und $\rho_0 = 0,0855$ g/cm³ startet (principal Hugoniot), ist in Abbildung 3.3 zu sehen. Die rote Kurve ist die Vorhersage aus der H-REOS.3 und die grüne Kurve die DFT-MD-Vorhersage von Desjarlais⁶⁹. Ebenfalls gezeigt sind experimentelle Daten mit verschiedenen Treibern: Gaskanonen^{136;237}, Sprengstoffe^{28;30}, magnetisch beschleunigte Platten¹⁶⁹ und Laserschocks^{64;133;281}. Die Schulter der theoretischen Kurven zeigt das vorhergesagte maximale Kompressionsverhältnis von $\sim 4,5$, welches gut mit den meisten Experimenten übereinstimmt. Die Laserexperimente tendieren aber alle zu einem höheren Kompressionsverhältnis von bis zu $\rho/\rho_0 \sim 6$. Dies kann zum einen durch die nicht perfekt planare Stoßfront in diesen Experimenten und im Fall von Da Silva und Hicks auch mit der Verwendung eines veralteten Quartz-Standards erklärt werden. Quartz wird in den Experimenten als Referenzmaterial zur Bestimmung des Drucks genutzt. Die neueste EOS für dieses Material stammt von Knudson und Desjarlais¹⁶⁶. Der neue Quartzstandard würde zu kleineren Kompressionsverhältnissen führen, wie es bei der Helium-Hugoniotkurve in Abbildung 3.4 gezeigt ist. Diese startet von einem Anfangszustand bei $T_0 = 4$ K und $\rho_0 = 0,123$ g/cm³. Die theoretischen Vorhersagen, basierend auf DFT-MD Rechnungen von Militzer²¹⁶ (gestrichelt) und der He-REOS.3, stimmen sehr gut überein. Kleinere Abweichungen können auf die unterschiedliche Teilchenzahl in den Simulationen (Militzer: 64, He-REOS.3: 108) zurückgeführt werden. Die experimentellen Daten von Nellis²³⁵ sind als Dreiecke zu sehen, die von Eggert *et al.*⁸³ als Kreise. Die Verschiebung der Eggert-Daten wegen des schon genannten Quartzstandards erfolgt um 10 %, wie es von Celliers⁵⁰ vorgeschlagen wird. Dieser Shift reicht offensichtlich noch nicht aus, um die Diskrepanz zwischen theoretischen und experimentellen Daten zu erklären. Eine genaue Reanalyse der Eggert-Daten mit der neuen Quartz-EOS von Knudson ist noch nicht publiziert, zeigt jedoch, dass die Eggert-Daten noch weiter als um 10 % verschoben werden und damit auch innerhalb der Fehlerbalken mit den DFT-MD-Werten übereinstimmen. Auf der anderen Seite stimmen die Nellis-Daten sehr gut mit den theoretischen Vor-

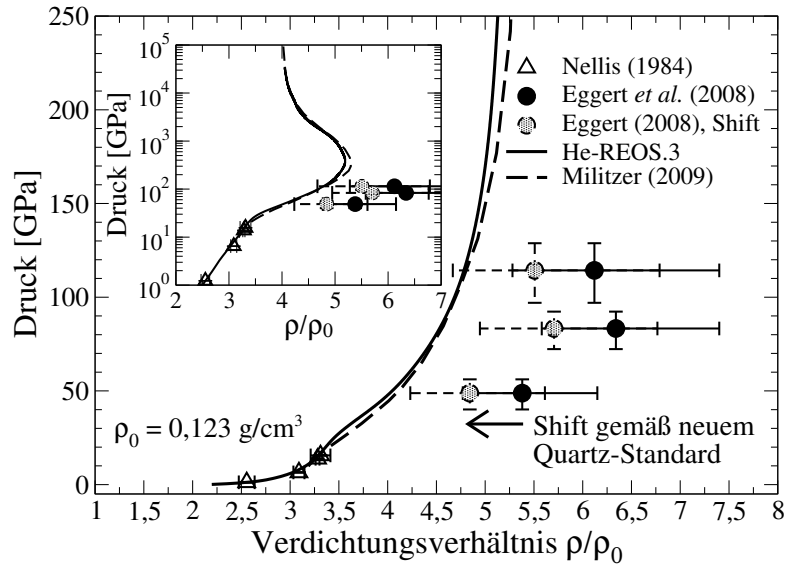


Abbildung 3.4.: Hugoniotkurve von Helium berechnet aus der He-REOS.3 (schwarz, durchgezogen), dem DFT-MD-Ergebnis von Militzer²¹⁶ und Experimenten von Nellis *et al.*²³⁵ und Eggert *et al.*⁸³ [A2].

hersagen überein. Insbesondere der Punkt bei $P = 16$ GPa, $T = 12000$ K und $\varrho = 0,41$ g/cm³ ist sehr interessant, da dieser Zustand im Braunen Zwerg Gliese-229b knapp unterhalb der Atmosphäre auftritt, siehe Kapitel 4.2.

Hugoniot-Experimente müssen nicht zwingend bei sehr niedrigen Temperaturen starten. Eine Möglichkeit Zustände abseits der principal Hugoniot zu erzeugen ist, die Probe vorher zu komprimieren. In den Experimenten von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ werden sowohl Wasserstoff als auch Deuterium in einer Diamantstempelzelle bei Raumtemperatur komprimiert, wie schon im vorhergehenden Abschnitt beschrieben. Auf diese Proben wurde dann mit einem Laser geschossen und eine Schockwelle induziert, sodass auch hier die Hugoniot-Gleichungen gelten. Neben dem Druck wurde auch die Temperatur und das Reflexionsvermögen der Probe gemessen. Die Ergebnisse zu Druck und Temperatur sind in den Abbildungen 3.5 und 3.6 zu sehen. Im Inset im linken Bild sieht man wieder die vorkomprimierten Zustände bei 300 K, die sehr gut mit den H-REOS.3-Daten übereinstimmen. Im Hauptbild sind dann die theoretischen DFT-MD-Vorhersagen basierend auf der EOS von Caillabet *et al.*⁴⁵ (gepunktet) und der H-REOS.3 (durchgezogen) sowie die experimentellen Werte zu Ausgangsdrücken von 0,3 GPa (orange:~ principal

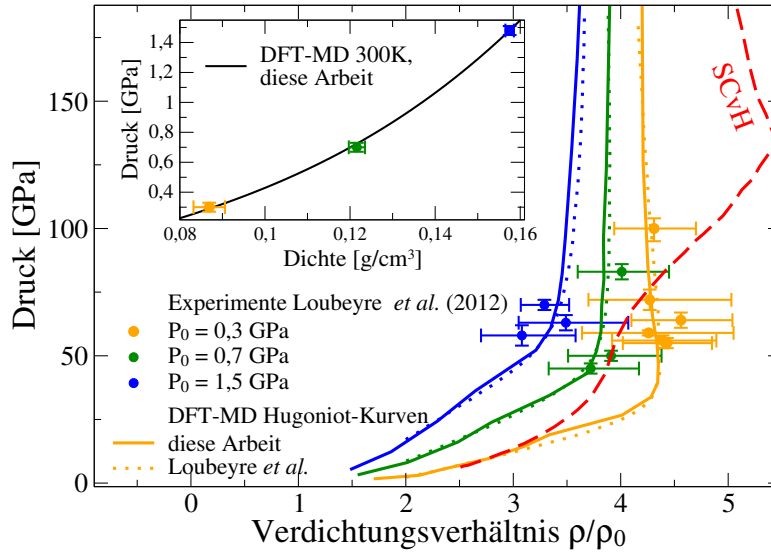


Abbildung 3.5.: Druck entlang von Hugoniotkurven aus vorverdichtetem Wasserstoff bei 297 K von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ im Vergleich mit DFT-MD-Vorhersagen (gestrichelt: Loubeyre *et al.*²⁰⁰, durchgezogen: H-REOS.3) [A8]. Anfangsdrücke P_0 sind im Inset mit der H-REOS.3-Isotherme gezeigt, siehe auch Abbildung 3.2. Zusätzlich sind die Vorhersagen aus der SCvH-EOS²⁸⁴ zu sehen.

Hugoniot), 0,7 GPa (grün) und 1,5 GPa (blau) gezeigt. Theorie und Experiment stimmen hier bemerkenswert gut überein, vor allem die voneinander unabhängigen DFT-MD-Ergebnisse, welche mit dem Code ABINIT¹⁰⁸ (gepunktete Linien⁴⁵) und mit VASP (H-REOS.3) berechnet wurden. Offensichtlich erreicht man mit höherer Vorkompression immer kleinere Kompressionsverhältnisse. Von ganz besonderem Interesse hier ist der Vergleich der H-REOS.3-Kurve mit der Vorhersage für die principal Hugoniot aus der EOS von Saumon *et al.*²⁸⁴ (SCvH), da mit deren Vorhersagen für den inneren Aufbau Brauner Zwerge im Kapitel 4 extensiv verglichen wird. Die Zustände der maximalen Kompression sind im Bereich der warmen dichten Materie (WDM), wo Bindungszustände durch hohen Druck aufgelöst werden und starke Korrelationen auftreten. Offenbar überschätzt die SCvH-Zustandsgleichung die Kompressibilität in diesem Bereich, was zu größeren Kompressionsverhältnissen abseits der experimentellen Daten führt, während die H-REOS.3-Daten sehr gut mit dem Experiment übereinstimmen.

Eine kleine Diskrepanz zwischen den experimentellen Werte und den theoretischen

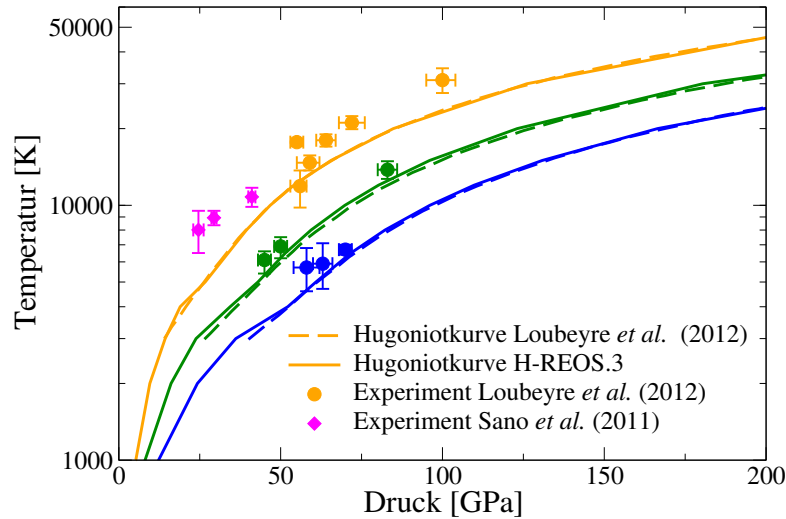


Abbildung 3.6.: Temperatur entlang von Hugoniotkurven aus vorverdichtetem Wasserstoff bei 297 K von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ im Vergleich mit DFT-MD-Vorhersagen (gestrichelt: Loubeyre *et al.*²⁰⁰, durchgezogen: H-REOS.3). Zusätzlich sind die Temperaturmesswerte von Sano *et al.*²⁸¹ zu sehen [A8].

Vorhersagen gibt es bei der Temperatur, siehe Abbildung 3.6. Während die DFT-MD-Kurven wieder sehr gut übereinstimmen, unterschätzen sie die von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ und Sano *et al.*²⁸¹ (violett) gemessenen Temperaturen. Die Erklärung hierfür ist das bekannte Bandlückenproblem bei DFT-Rechnungen, die das PBE-XC-Funktional (aber auch andere XC-Funktionale wie LDA) benutzen. Die Bandlücke wird in den DFT-MD-Rechnungen zu klein vorhergesagt⁴¹, sodass sie sich schon bei kleineren Temperaturen oder kleineren Drücken schließt und die Dissoziation damit zu früh einsetzt. Deshalb sind die dissoziationsbedingten Schultern in den DFT-MD-Kurven um 25 GPa unterhalb der gemessenen Temperaturen. Dieses Problem kann durch die Verwendung von besseren Hybrid-Funktionalen, wie dem von Heyd, Scuseria und Ernzerhof (HSE^{128;129;131;132}), siehe Kapitel 5, behoben werden.

Die Vorkompression der Probe muss nicht zwingend wie bisher diskutiert in Diamantstempelzellen geschehen. Eine weitere Möglichkeit ist es, die Probe in einem Hugoniotexperiment nach dem ersten Schock noch einmal mit weiteren Schocks zu komprimieren. Dies geschieht dadurch, dass die Schockwelle an der Rückwand der Probenkammer reflektiert wird und noch einmal durch die Probe läuft, dann

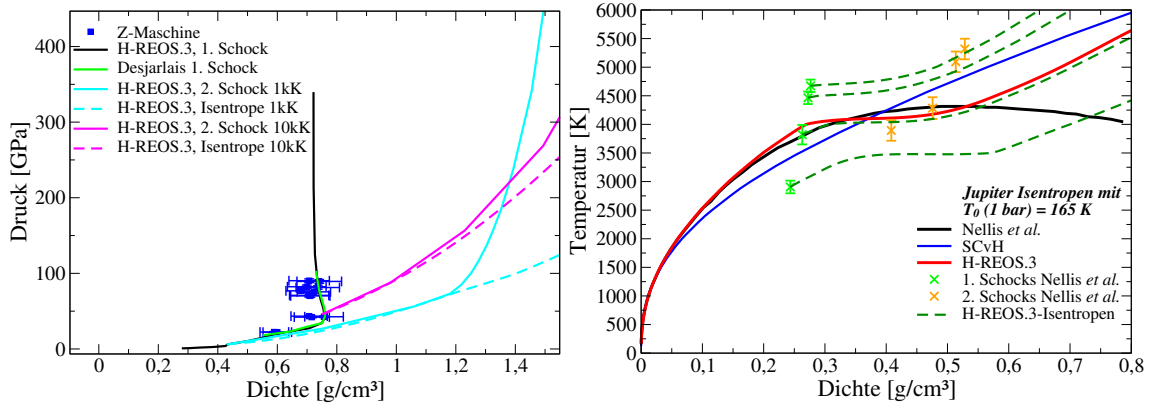


Abbildung 3.7.: Linkes Bild: Hugoniotkurve von Deuterium (Experiment von Knudson *et al.* (blaue Quadrate)¹⁶⁹, DFT-MD-Ergebnisse von Desjarlais (grün)⁶⁹ und H-REOS.3 (schwarz) [A8]. Außerdem sind theoretische Vorhersagen für die zweiten Schocks und die entsprechenden Isentropen (gestrichelt) zu sehen, die von 1000 K und $0,434 \text{ g/cm}^3$ bzw. von 10000 K und $0,757 \text{ g/cm}^3$ starten. Rechtes Bild: Experimente mit reflektierten Schockwellen an Wasserstoff^{136;238}. Der erste Schock (grün) und der entsprechende zweite Schock (orange) sind mit grün gestrichelten Linien verbunden. Die DFT-MD-Isentropen (grün gestrichelt) starten vom ersten Schock. Ebenfalls zu sehen sind Jupiterisentropen berechnet von Nellis *et al.*²³⁸ (schwarz), aus der SCvH-EOS (blau) und aus der H-REOS.3 (rot) [A8].

wieder am Pusher reflektiert wird und wieder durch die Probe läuft usw. Diese Art von Komprimierung wird in der Literatur „reverberating shock-experiments“ (reflektierte Schockwellen) genannt und wurden unter anderem von Knudson¹⁶⁹ und in der Gruppe von Nellis^{136;238} durchgeführt, mit deren Ergebnissen im Folgendem verglichen werden soll. Wie im linken Bild von Abbildung 3.7 zu sehen ist, verläuft schon der zweite Schock einer Hugoniot-vorkomprimierten Probe nahezu isentrop. Zu sehen sind noch einmal die Ergebnisse zur principal Hugoniot (Experiment: blaue Quadrate¹⁶⁹, Theorie: H-REOS.3 (schwarze Kurve) und DFT-MD von Desjarlais⁶⁹ (grüne Kurve)) und zweite Schocks, die aus der H-REOS.3 über die Hugoniot-Relationen ausgehend von der principal Hugoniot berechnet wurden, sowie H-REOS.3-Isentropen, die von den gleichen Ausgangspunkten starten. Diese sind zum einen bei 1000 K und $0,434 \text{ g/cm}^3$ (cyane) und 10000 K und 1 g/cm^3 (magenta). Offensichtlich verläuft die zweite Kompression

3. Hochdruckexperimente

(durchgezogene Kurven) länger entlang einer Isentrope (gestrichelte Kurven), je kühler der vorkomprimierte Anfangszustand ist. Dieses Verhalten wurde auch für Wasser festgestellt¹⁶⁸.

Die Experimente von der Gaskanonen-Gruppe um Nellis an Wasserstoff^{136;238} erreichten Dichten und Temperaturen, wie sie für das Innere von Jupiter relevant sind. Auf Grundlage dieser Daten wurde von der Gruppe eine Zustandsgleichung konstruiert um eine Isentrope zu Jupiterbedingungen ($T(1 \text{ bar} = 165\text{K})$) zu berechnen. Diese ist als schwarze Kurve im rechten Bild von Abbildung 3.7 zu sehen, zusammen mit den entsprechenden Isentropen, welche aus der SCvH-Zustandsgleichung (blau) und der H-REOS.3 (rot) berechnet wurden. Im Gegensatz zu der SCvH-Isentrope flacht die H-REOS.3-Kurve bei $0,3 \text{ g/cm}^3$ ab, aufgrund der Dissoziation der Wasserstoffmoleküle^{99;238}, siehe auch Kapitel 5. Der Sattelpunkt der H-REOS.3-Kurve ist etwas unterhalb der Nellis-Isentrope, wegen des schon erwähnten Bandlückenproblems. Bei höheren Dichten und Temperaturen ist Wasserstoff vollständig dissoziiert und die H-REOS.3 sagt ein weiteres Ansteigen der Isentrope voraus, im Gegensatz zum Verlauf der Nellis-Kurve. Bei letzterer sind die Daten für $\rho > 0,52 \text{ g/cm}^3$ extrapoliert, was zu dem unerwarteten Abfall führt. Wichtig ist jedoch, dass die beiden Kurven in dem Bereich, der mit experimentellen Daten untermauert ist, übereinstimmen. Um dieses sehr gute Zusammenspiel von Theorie und Experiment weiter zu verdeutlichen, sind in dem Bild auch noch die Messwerte der ersten Schocks (grün) und die zugehörigen zweiten Schocks (orange) zu sehen. Von den grünen Startpunkten wurden wieder H-REOS.3-Isentropen berechnet (grün gestrichelte Kurven). Die obersten drei Kurven treffen die orangen Punkte sehr gut, was die These, die reflektierten zweiten Schocks sind quasi-isentrop, unterstützt. Die Diskrepanz zwischen der H-REOS.3-Isentropen und dem untersten Messwertpaar kann wieder auf das Bandlückenproblem zurückgeführt werden, welches Dissoziation bei tieferen Temperaturen vorhersagt und damit auch das Abflachen zu früh auftritt.

3.3. Quasi-isentrope Kompressionsexperimente

Eine weitere Möglichkeit sehr hohe Drücke bei moderaten Temperaturen zu erreichen sind quasi-isentrope Kompressionsexperimente. Im Gegensatz zu einem Hugoniot-Experiment, bei dem die Probe sehr stark aufgeheizt wird, wird das Material bei diesen Experimenten durch eine Sequenz von einfallenden und reflektierten Schockwellen mehrstufig komprimiert⁹⁵. Wählt man die Anfangsbedingungen $P_0(\varrho_0, T_0)$ ähnlich dem Äußeren Großer Planeten, können hier direkt thermodynamische Pfade im Innern von GPs und BDs geprobt werden. Leider gibt es aber kein Pendant zu den Hugoniot-Gleichungen, sodass die Messung des Drucks in dieser Klasse von Experimenten sehr schwierig ist und bisher nur von Boriskov *et al.*²⁹ realisiert wurde, siehe unten.

Im Folgendem sollen quasi-isentrope Experimente untersucht werden, welche Sprengstoffe nutzen um den Nicht-Metall-Metall-Übergang in Wasserstoff/Deuterium zu messen (siehe auch Abschnitt 3.5)⁹⁶, die Coldcurve im Wasserstoff/Deuterium-Festkörper zu bestimmen²⁹ und das Verhalten von Deuterium (Helium) bei Drücken bis zu 18 Mbar²²¹ (50 Mbar^{222;336}) zu bestimmen. Die Probe wurde in jedem Experiment durch Sprengstoff in einer sphärischen oder zylindrischen Symmetrie komprimiert, wobei mittels Röntgenstrahlen Bilder der Probe gemacht wurden, aus denen direkt das Kompressionsverhältnis und bei Kenntnis der Anfangsdichte die Enddichte ermittelt werden konnte. Die mutmaßlichen Temperaturen im Experiment wurden anschließend über hydrodynamische Simulationen (Hydrocode) berechnet, welche unter Nutzung einer Modellzustandsgleichung (Wasserstoff/Deuterium^{97;174}, Helium^{80;97}) in der Regel die gemessene Kompression reproduzierte. Wie schon erwähnt wird außer beim Boriskov-Experiment²⁹ bei allen anderen Experimenten auch der Druck im komprimierten System über einen Hydrocode ermittelt, sodass ein Vergleich mit diesen Resultaten eher ein Vergleich von Vorhersagen verschiedener Zustandsgleichungen ist. Solch ein Vergleich mit den hier vorgestellten H-REOS.3 und He-REOS.3 ist zu gegebenen Anfangsbedingungen ϱ_0 und T_0 und bekannter thermischer und kalorischer Zustandsgleichung durch Lösungen der folgenden Differentialgleichung möglich:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \varrho}\right)_S = \frac{T}{\varrho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\varrho \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_\varrho \quad (3.4)$$

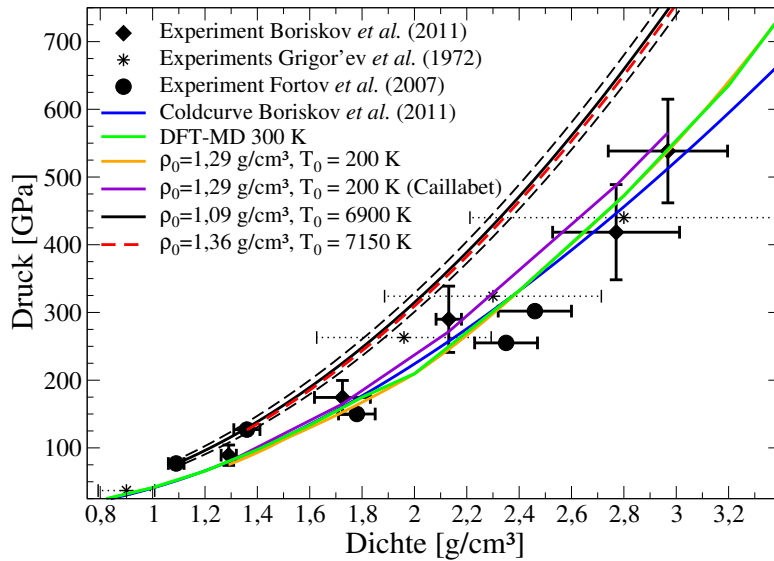


Abbildung 3.8.: Quasi-isentrope Kompressionsexperimente an Deuterium (Kreise⁹⁶, Diamanten²⁹, Sterne¹¹⁴). Zum Vergleich sind H-REOS.3-Isentropen [A8] zu sehen, welche vom ersten Punkt (schwarze Kurven) und zweiten Punkt des Fortovexperiments bzw. vom ersten Punkt des Boriskovexperiments (orange und lila⁴⁵ Kurven) starten. Ebenfalls gezeigt sind die 300 K-Isotherme der H-REOS.3 (grün) sowie die experimentelle Coldcurve von Boriskov (blau).

Wie in Abschnitt 3.1 gezeigt, stimmt die 300 K-Isotherme der H-REOS.3 sehr gut mit den statischen Diamantstempelexperimenten überein. Einen dynamischen Zugang zu dieser Coldcurve über quasi-isentrope Kompression ist Boriskov *et al.*²⁹ gelungen. Dort wurde die Dichte des Systems zeitgleich mit dem Druck gemessen. Dieser wurde über die bekannte Zustandsgleichung eines Referenzmaterials (hier: Aluminium¹¹¹) in der Nachbarschaft der Probe bestimmt. Die Anfangsbedingungen für dieses Experiment sind bei Temperaturen um 5-10 K, die nicht in der H-REOS.3 enthalten sind. Deshalb wurde der erste experimentelle Punkt mit $T_0 = 200$ K, $\rho_0 = 1,29$ g/cm³ und $P_0 = 75$ GPa als Anfangspunkt gewählt. Die entsprechende Isentrope (orange Kurve in Abbildung 3.8) stimmt sehr gut mit der grünen Kurve (300 K aus H-REOS.3) sowie mit der von Boriskov *et al.* vorhergesagten Coldcurve (blaue Kurve und verbleibene Datenpunkte (Diamanten)) überein. Mit Hilfe dieser Ergebnisse können wir auch die Temperaturen bestätigen, welche nicht wesentlich wärmer als 300 K werden, siehe auch Tabelle A.1. Da dieses Experiment im Festkörper durchgeführt wurde, kann man hier auch

den Effekt von Phononen studieren, der in der H-REOS.3 wegen des Fokus auf astrophysikalische Anwendungen vernachlässigt wurde. Jedoch werden Phononen in der EOS von Caillabet *et al.*⁴⁵ explizit berechnet. Die lila Kurve in Abbildung 3.8 zeigt eine Isentrope mit Phononenbeiträgen, welche systematisch höher liegt, als die vom gleichen Startpunkt beginnende orange Kurve, d.h. Phononen führen zu einem additiven, positiven Beitrag zum Druck. Trotzdem reproduzieren beide DFT-MD-Kurven das Experiment innerhalb der Fehlerbalken. In einem

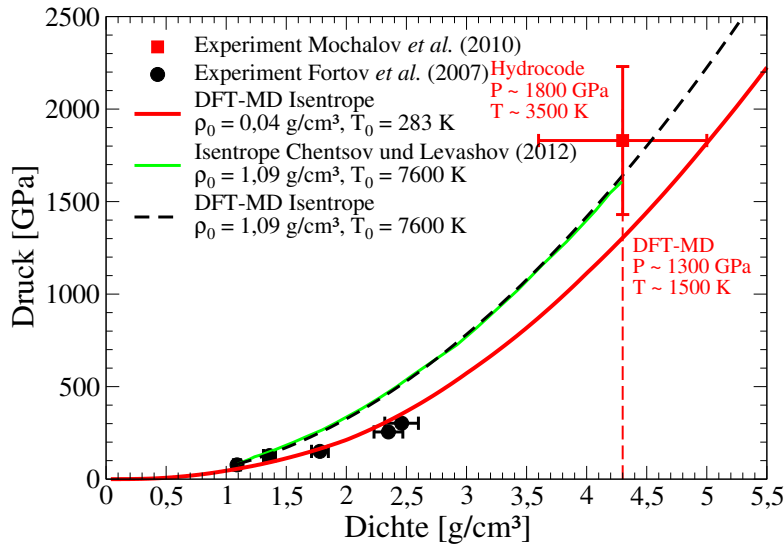


Abbildung 3.9.: Quasi-isentrope Kompressionsexperimente an gasförmigen Deuterium (Kreise⁹⁶, Quadrat²²¹). Zum Vergleich ist die H-REOS.3-Isentrope [A8] zu sehen, welche vom ersten Punkt (schwarze Kurve und grüne Kurve⁵⁹) starten. Gezeigt ist ebenfalls die DFT-MD-Isentrope, welche vom Anfangspunkt der Fortov- und Mochalovexperimente startet, siehe Text (rote Kurve).

weiteren quasi-isentropen Experiment fanden Fortov *et al.*⁹⁶ erste Hinweise auf einen Phasenübergang erster Ordnung vom nichtmetallischen zum metallischen Deuterium (engl. PPT: plasma phase transition), siehe auch Abschnitt 3.5. Dieses Experiment startete von einem gasförmigen Anfangszustand ($\rho_0 = 0,04 \text{ g/cm}^3$, $T_0 = 283 \text{ K}$). Im Gegensatz zum vorher beschriebenen Experiment zur Cold-curve wurde hier lediglich die Dichte gemessen. Die Drücke wurden, wie oben beschrieben, mittels zweier verschiedener Zustandsgleichungen in einem Hydrocode ermittelt. Die Ergebnisse sind als Kreise in den Abbildungen 3.8 und 3.9

zu sehen. Die Schlussfolgerung auf einen Phasenübergang erster Ordnung kommt von dem angedeuteten Dichtesprung am dritten Punkt bei ca. $1,8 \text{ g/cm}^3$. Die folgende Analyse wird zeigen, dass jedoch die letzten drei experimentellen Punkte fragwürdig sind. Da es sich um quasi-isentrope Kompression handelt, müssen für eine feste Anfangsbedingung alle Punkte des Experiments auf einer Kurve liegen, welche man auch von jedem dieser Punkte berechnen können muss. In Abbildung 3.8 sind solche Isentropen gezeigt. Die schwarze Kurve startet vom ersten Punkt $\rho_0 = 1,09 \text{ g/cm}^3$, $P_0 = 77 \text{ GPa}$, $T_0 = 6900 \text{ K}$. Die in der Arbeit gegebenen Temperaturen von 3100 K bzw. 2100 K können wir mit der H-REOS.3 bei vorgegebenen Druck und Dichte nicht reproduzieren. Auf der schwarzen Kurve liegt der zweite Datenpunkt und die rot gestrichelte Kurve, die von dem Punkt startet, im Fehlerschlauch (schwarz gestrichelt), der vom ersten Punkt ausgeht. Die verbleibenden drei Punkte liegen jedoch nicht auf diesen Kurven, sondern sogar unterhalb der Coldcurve, was thermodynamisch nicht möglich ist und somit diese Punkte fragwürdig macht. Unabhängig von diesem Ergebnis aus der H-REOS.3 haben auch Chentsov und Levashov⁵⁹ eine Isentrope vom ersten Datenpunkt der Fortov-Experimente auf Basis der DFT-MD gerechnet (grüne Linie in Abbildung 3.9), welche eine etwas höhere Starttemperatur von 7600 K hat, aber mit unserer Isentrope übereinstimmt. Rechnet man eine Isentrope von den Anfangsbedingungen der Fortov-Experimente ($\rho_0 = 0,04 \text{ g/cm}^3$, $T_0 = 283 \text{ K}$), so erhält man die rote Kurve¹⁹ im eben genannten Bild. Diese verläuft glatt zwischen den fünf Datenpunkten mit einer signifikanten Abweichung durch und wird hier als alternativer thermodynamischer Pfad der Experimente vorgeschlagen. Die Werte für Druck und Temperatur an den gemessenen Dichten sind in Tabelle A.1 zu finden.

Im Hinblick auf die Diskussion um den PPT wird sich in Abschnitt 3.5 zeigen, dass dieser bei wesentlich höheren Drücken von $\sim 3 \text{ Mbar}$ unterhalb von 2000 K stattfindet. Diese Messung wird von *ab initio*-Rechnungen mit dem vdw-DF2-Funktional gestützt. Auch frühere Rechnungen mit dem PBE-Funktional^{196;230} sagten kritische Parameter von $T_c \sim 2000 \text{ K}$ und $P_c \sim 1 \text{ Mbar}$ vorher, was ebenfalls weit unterhalb der von Fortov *et al.* vorgeschlagenen Daten liegt. In diesem Bereich oberhalb des kritischen Punktes würde man einen steilen, jedoch kontinuierlichen Anstieg in der elektrischen Leitfähigkeit erwarten, was auch in dem Experiment

gemessen wurde.

Eine Fortsetzung des Fortov-Experiments zu einer 108-fachen Kompression der Probe ist das Experiment von Mochalov *et al.*²²¹, welches bei einer bis dato unerreichten Dichte für Deuterium von $4,3 \text{ g/cm}^3$ einen Druck von 18 Mbar bei 3500 K vorhersagt. Druck und Temperatur wurden in diesem Experiment auch wieder theoretisch über einen Hydrocode bestimmt. Nimmt man den oben vorgeschlagenen Pfad aus der H-REOS.3 für die Anfangsbedingung $\rho_0 = 0,04 \text{ g/cm}^3$, $T_0 = 283 \text{ K}$ (rote Kurve in Abbildung 3.9), so findet man bei der gemessenen Dichte mit DFT-MD-Rechnungen einen Druck von 13 Mbar bei 1500 K.

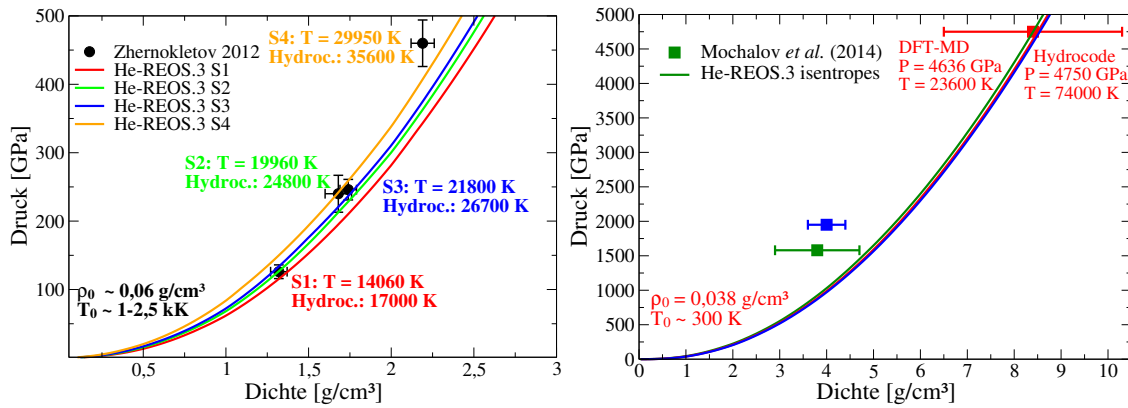


Abbildung 3.10.: Quasi-isentrope Kompression von Helium nach Zhernokletov *et al.*³³⁶ (Kreise im linken Bild) und Mochalov *et al.*²²² (Quadrate im rechten Bild). Im linken Bild stehen an den zur farbigen Isentropen gehörenden experimentellen Punkt in der gleichen Farbe die Vorhersagen für Druck und Temperatur aus der He-REOS.3 und aus dem Hydrocode, der zur Auswertung der Experimente genutzt wurde, siehe Text. Die farbigen He-REOS.3-Isentropen im rechten Bild gehören zu den gleichfarbigen experimentellen Punkt, siehe Text und Tabelle A.2.

Ähnlich verhält es sich bei den quasi-isentropen Experimenten mit anfangs gasförmigen Helium. Die vier Punkte von Zhernokletov *et al.*³³⁶ sind als bunte Kreise im linken Bild von Abbildung 3.10 zu sehen, während die Punkte von Mochalov *et al.*²²² als bunte Quadrate im rechten Bild gezeigt sind. Drücke und Temperaturen sind hier ebenfalls aus einem Hydrocode entnommen. Die durchgezogenen Kurven in dem Bild sind Isentropen aus der He-REOS.3 und gehören je nach Farbe zu den entsprechenden farbigen Datenpunkten, welche sich leicht in ihren An-

fangsbedingungen unterscheiden. Die exakten thermodynamischen Werte an den gemessenen Dichten sind in Tabelle A.2 zu finden. Die Punkte von Zhernokletov *et al.* berühren zumindest in ihren Fehlerbalken die entsprechende Isentrope, während die Vorhersagen bezüglich der Temperaturen sich jedoch um bis zu 5000 K unterscheiden. Noch deutlicher ist dieser Unterschied bei den Mochalov-Punkten, von denen die beiden mit der kleinsten Dichte ihre jeweiligen Isentropen nicht berühren. Interessanterweise liegt der Punkt maximaler Kompression bei $8,4 \text{ g/cm}^3$ genau auf der zugehörigen Isentrope, sodass der durch die He-REOS.3 vorhergesagte Druck von 46,4 Mbar sehr gut mit den von Mochalov gerechneten Wert von 47,5 Mbar übereinstimmt. Die Temperaturen unterscheiden sich jedoch um 60000 K (He-REOS.3: 13700 K, Mochalov: 74000 K). Ein fragwürdiger Aspekt ist, dass die experimentellen Punkte trotz sehr ähnlicher Anfangsbedingungen und quasi-isentroper Kompression so stark streuen, im Gegensatz zu den berechneten Verläufen der Kompression auf Grundlage der He-REOS.3. Diese Diskrepanz könnte unter anderem durch neue Experimente, beispielsweise an der National Ignition Facility (NIF) in Livermore oder dem Omega-Laser in Rochester, geklärt werden.

Offensichtlich ist die experimentelle Bestimmung von Druck und Temperatur in quasi-isentropen Kompressionsexperimenten ein wichtiges Thema für die Zukunft, denn mit dieser Technik kann man Zustände weit im Innern von Großen Planeten erreichen, siehe auch Kapitel 4. Beispielsweise wird für Jupiter ein Druck am Kernrand von 40 Mbar errechnet. Eine Messung der vollen thermischen Zustandsgleichung $P(\rho, T)$ könnte dann helfen konkurrierende Strukturmodelle besser zu bewerten²⁴². Einige mögliche Kompressionspfade, welche gleichzeitig das Innere von Großen Planeten darstellen, sind in Abbildung 3.11 gezeigt. Diese H-He-Isentropen mit solarem Heliumgehalt (siehe Kapitel 4) sind in der Dichte für den Vergleich mit den Deuteriumexperimenten um den Faktor zwei skaliert. Die Jupiter-Isentropen wurden mit der LM-REOS.3 (schwarz) und der SCvH-EOS²⁸⁴ für eine Anfangsbedingung $T(1 \text{ bar}) = 170 \text{ K}$ berechnet. Die Isentropen der Hot Jupiters sind über eine äußere Randbedingung definiert, welche das 100-bar-Level nach 4,5 Milliarden Jahren der Auskühlung für Exoplaneten mit einer Jupitermasse nach Fortney *et al.*⁹³ festlegt (siehe Abb. 3 in der Publikation). Diese Isentropen können zukünftig dazu dienen, neue quasi-isentrope Experimente zu entwerfen, die

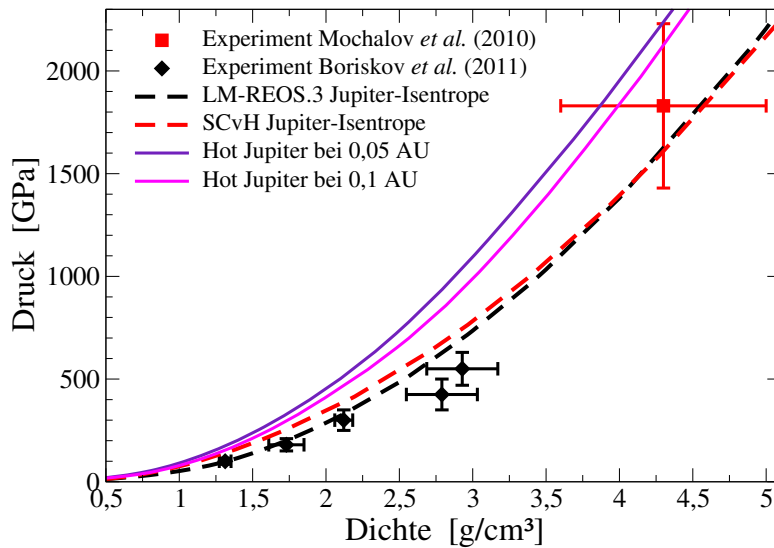


Abbildung 3.11.: H-He-Isentropen für Jupiterbedingungen aus der LM-REOS.3 (schwarz) und der SCvH-EOS²⁸⁴ (rot) zusammen mit Isentropen für Exoplaneten mit einer Jupitermasse und experimentellen Punkten für Deuterium [A8]. Exoplaneten mit 0,1 Astronomischen Einheit (AE) Abstand vom Mutterstern haben $T(100 \text{ bar}) = 1625 \text{ K}$ (magenta) und solche mit 0,05 AE Abstand $T(100 \text{ bar}) = 1320 \text{ K}$ ⁹³ (violett).

sich mehr an den Bedingungen tief im Innern astrophysikalischer Objekte orientieren.

3.4. Experimente mit Thomson-Streuung

Die Diagnostik von warmer dichter Materie (WDM) ist ein anspruchsvolles Gebiet, da man optische Quellen benötigt, die in Proben bei Festkörperdichten eindringen können, also eine sehr kurze Wellenlänge haben. Zusätzlich benötigt man hohe Photonendichten, da ihr Streuquerschnitt an Elektronen mit $\sigma_T = 6,65 \cdot 10^{-29} \text{ m}^2$ sehr gering ist¹⁵¹. Solche Röntgenquellen können zum einen durch sehr starke optische Laser über ein Konvertermaterial erzeugt werden. Zum anderen stehen mit der Entwicklung der Freie Elektronen Laser (FEL) solche Röntgenquellen direkt zur Verfügung¹⁸⁸. Mittels der Röntgen-Thomson-Streuung kann man die Struktur von WDM sowie deren Temperatur und Ionisationsgrad bestimmen, wie

im Folgenden kurz beschrieben wird. Detaillierte Ausführungen sind im Review-Artikel von Glenzer und Redmer¹⁰⁴ sowie in den Dissertationen von Thiele³⁰⁸ und Sperling²⁹⁶ zu finden.

Zur Unterscheidung der Streuung in nicht-kollektive und kollektive Anregung kann der Streuparameter $\alpha = \lambda_0/4\pi\lambda_D \sin(\Theta/2)$ ²⁸⁰ herangezogen werden. Er misst das Verhältnis der Wellenlänge des einfallenden Lasers λ_0 zu der Abschirmlänge des Plasmas λ_D in Abhängigkeit vom Streuwinkel Θ . Ist das Verhältnis kleiner eins ($\lambda_0 < \lambda_D$), wird nicht-kollektiv an Teilchen gestreut, während bei $\alpha > 1$ kollektive Schwingungen der freien Elektronen, die Plasmonen, aufgelöst werden.

Das sogenannte Streuspektrum¹⁰⁴

$$P_s(\vec{R}, \omega) d\omega d\Omega = \frac{P_0 r_e^2}{2\pi A} d\Omega |\vec{k}_S \times (\vec{k}_S \times \vec{E}_0)|^2 N_e S_{ee}(\vec{k}, \omega) \quad (3.5)$$

gibt das Verhältnis von gestreuter zur einfallenden Strahlungsleistung $P_s(\vec{R}, \omega)/P_0$ pro Frequenzintervall $d\omega$ und Raumwinkel $d\Omega$ bei Streuung an N_e Elektronen und bestrahlter Fläche A an. Das doppelte Vektorprodukt aus dem Streuvektor \vec{k}_S und der Amplitude der einfallenden Strahlung \vec{E}_0 ist der Polarisationssterm, welcher bei linear polarisiertem Licht des FELs den Wert $1 - \sin^2 \Theta \cos^2 \varphi$ annimmt¹⁵¹. Der klassische Elektronenradius ist definiert als $r_e = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) \sim 2,8 \cdot 10^{-15}$ m. Der totale dynamische Strukturfaktor der Elektronen $S_{ee}(\vec{k}, \omega)$ ist das Bindeglied zwischen dem Experiment und der Theorie. Dabei wird im folgenden ein isotropes Medium angenommen, was für ein Plasma gerechtfertigt ist, sodass $k = |\vec{k}|$ gilt. Nach Chihara^{60;61} kann er im Rahmen des chemischen Bildes in Beiträge freier und gebundener Elektronen aufgeteilt werden:

$$\begin{aligned} S_{ee}(k, \omega) &= Z_f S_{ee}^0(k, \omega) + |f_i(k) + q(k)|^2 S_{ii}(k, \omega) \\ &+ Z_b \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' S_c(k, \omega) S_s(k, \omega - \omega'). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Der erste Term ist der Beitrag der freien Elektronen, welcher mit dem Ionisationsgrad Z_f gewichtet ist und aus dem Imaginärteil der inversen dielektrischen Funktion berechnet werden kann. Der Ion-Ion-Strukturfaktor $S_{ii}(k, \omega)$ beschreibt den Einfluss gebundener Elektronen und wird mit dem atomaren Formfaktor $f_i(k)$ der stark gebundenen Elektronen und dem Beitrag schwach gebundener Elektronen in der Abschirmwolke $q(k)$ gewichtet. Der letzte Term beschreibt den Einfluss

ionisierter Elektronen, die durch den einfallenden Laser erzeugt werden (bound-free-transitions). Der statische Strukturfaktor $S(k)$ ist definiert als Frequenzintegral,

$$S_{ee}(k) = \int d\omega S_{ee}(k, \omega) \quad , \quad (3.7)$$

und ist über die Fouriertransformation eng mit der radialen Paarverteilungsfunktion $g(r)$ verknüpft:

$$S(k) = 1 + n \int_V d^3r (g(r) - 1) \exp(ik \cdot r) \quad , \quad (3.8)$$

wobei $g(r)$ direkt aus DFT-MD-Simulationen gewonnen werden kann, siehe Kapitel 2. Einen Weg $S_{ii}(k, \omega)$ unmittelbar aus DFT-MD Simulationen zu berechnen, findet man in der Veröffentlichung von Rüter und Redmer²⁷⁸.

Sowohl der Strukturfaktor als auch die isotherme Kompressibilität κ_T sind ein Maß für die Dichtefluktuationen im System und können für $k \rightarrow 0$ über die sog. Kompressibilitätsgleichung verknüpft werden:

$$\kappa_T = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial P} \right)_T = \frac{1}{nk_B T} \left(1 + n \int_V d^3r (g(r) - 1) \right) = \frac{S(0)}{nk_B T} .$$

κ_T kann ebenfalls direkt aus DFT-MD-Simulationen über die thermische Zustandsgleichung $P(\varrho, T)$ berechnet werden.

Aus dem Strukturfaktor der freien Elektronen kann der Ionisationsgrad und die Elektronentemperatur des Systems bestimmt werden, siehe Abbildung 2.3 in der Dissertation von Sperling²⁹⁶. Der einfallende Laserpuls wechselwirkt mit den kollektiven Plasmaschwingungen (Plasmonen³¹⁴) im Sinne einer erzwungenen, gedämpften Schwingung mit der maximalen Resonanzfrequenz ω_{res} bei der Plasmonenfrequenz. Von den Plasmonen wird Energie in Abhängigkeit von der Frequenz aus dem Laserfeld absorbiert oder an das Feld emittiert, sodass sich durch Energie- und Impulserhaltung je ein Peak bei $\pm\omega_{res}$ ausbildet. Diese Dispersion ist über die Bohm-Groß-Relation²⁷ gegeben:

$$\hbar^2 \omega(k)^2 = \hbar^2 \omega_{pl}^2 + \frac{3\hbar^2 k_B T_e}{m_e} k^2 \quad , \quad (3.9)$$

mit den Naturkonstanten m_e, k_B, \hbar und der Wellenzahl $k = 4\pi \sin(\Theta/2)/\lambda_0$. Die Plasmonen unterliegen der Bosestatistik, sodass aus dem Amplitudenunterschied an den Maxima über die sog. detaillierte Balance $\frac{S(-k, -\omega_{res})}{S(k, \omega_{res})} = \exp(\hbar\omega_{res}/k_B T_e)$

3. Hochdruckexperimente

die Elektronentemperatur T_e berechnet werden kann. Mit der Plasmafrequenz $\omega_{\text{pl}} = \sqrt{n_e e^2 / \epsilon_0 m_e}$ kann dann aus Gleichung 3.9 die freie Elektronendichte n_e berechnet werden. Ist dann zusätzlich die Ionendichte n_i und Ionentemperatur T_i aus dem Ion-feature bekannt, kann auch der Ionisationsgrad $Z_f = n_e / n_i$ und in einem Zwei-Temperatur-System $T_e \neq T_i$ der Temperaturunterschied bestimmt werden.

Damit sind die Grundlagen beschrieben, um im Folgendem zwei Experimente vorzustellen, die vom Author dieser Arbeit theoretisch mit DFT-MD-Rechnungen begleitet wurden [A4,A6,A7].

3.4.1. Ionisationsgrad entlang der Hugoniotkurve von Deuterium

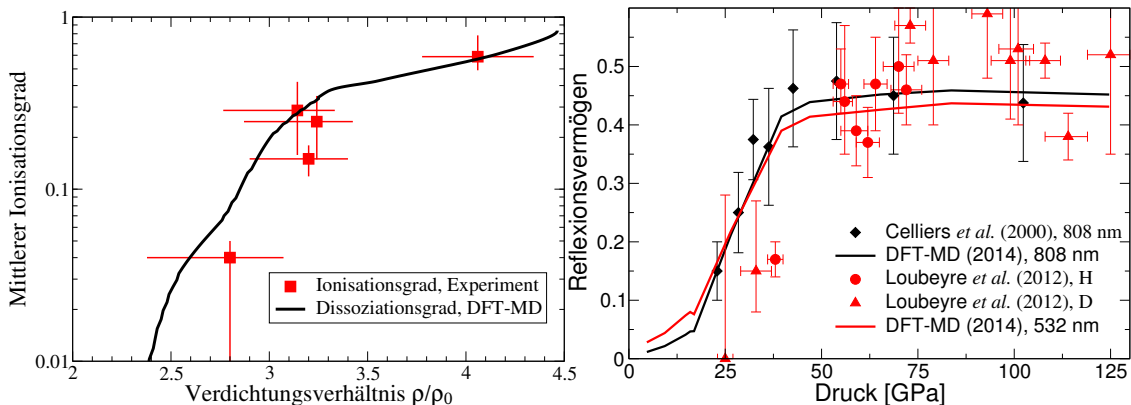


Abbildung 3.12.: Linkes Bild: Mittels Thomsonstreuung gemessener Ionisationsgrad von Deuterium entlang der Hugoniotkurve (Quadrate⁶⁶) zusammen mit dem aus DFT-MD-Simulationen berechneten Dissoziationsgrad (schwarze Kurve) [A4]. Rechtes Bild: Reflexionsvermögen von Deuterium (D) und Wasserstoff (H) entlang der Hugoniotkurve. Experimentelle Daten bei 808 nm von Celliers *et al.*⁴⁹ (Diamanten) und bei 532 nm von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ (H: Kreise, D: Dreiecke) zusammen mit den Vorhersagen aus DFT-MD-Rechnungen in der entsprechenden Farbe [A4].

An der Janus Laser Facility in Livermore wurde Deuterium mit einem Laser geschockt, sodass die Probe entlang einer Hugoniotkurve komprimiert wurde. Wie

oben beschrieben konnte dann mittels Thomsonstreuung der Ionisationsgrad des Systems für Kompressionen zwischen 2,8 und 4,1 (entspricht Drücken zwischen 10 und 30 GPa) bestimmt werden. Das Ergebnis ist im linken Bild von Abbildung 3.12 zu sehen. Die experimentellen Punkte für den Ionisationsgrad (Quadrate⁶⁶) stimmen sehr gut mit den DFT-MD-Vorhersagen für den Dissoziationsgrad α_{Disso} (schwarze Kurve) überein. Letzterer wurde über die Koordinationszahl $K(r)$ am Molekülpeak r_{Mol} berechnet, siehe Abbildung 2.5 und Abschnitt 2.2.1, wobei gilt $\alpha_{\text{Disso}} = 1 - 2K(r_{\text{Mol}})$. Dieses Ergebnis legt nahe, dass Deuterium unter den thermodynamischen Bedingungen entlang der Hugoniotkurve kontinuierlich vom molekularem Fluid in ein elektrisch leitendes Plasma übergeht, ohne einen nicht-leitenden atomaren Zwischenzustand einzunehmen. Im Sinne des chemischen Bildes würde aufgrund der unterschiedlichen Dissoziations- (4,5 eV/Molekül) und Ionisationsenergien (13,6 eV/Atom) Deuterium erst dissoziieren $H_2 \rightleftharpoons H + H$ und dann durch Temperatur- oder Druckeffekte ionisieren $H \rightleftharpoons e + p$. Das scheint aufgrund der starken Korrelationen im System aber nicht der Fall zu sein. Gestützt wird dieses Resultat durch zwei weitere Fakten.

Der erste kommt aus der Modellierung von Jupiter, siehe Kapitel 4. Die Experimente finden genau unter den Bedingungen statt, bei denen sich im Phasendiagramm (Abbildung 2.3) die Hugoniotkurve und die Jupiterisentropie schneiden. Das Abflachen der Jupiterisentropie liegt ebenfalls an der Dissoziation von Wasserstoff, was gleichzeitig von einem starken Anstieg in der elektronischen Leitfähigkeit begleitet ist⁹⁹, siehe auch Kapitel 5. Des Weiteren gibt es Experimente zum Reflexionsvermögen entlang der Hugoniotkurve von Celliers *et al.*⁴⁹ bei einer Wellenlänge von 808 nm und von Loubeyre *et al.*²⁰⁰ bei 532 nm. Die Methodik zur Berechnung von optischen Eigenschaften aus DFT-MD-Rechnungen ist in Kapitel 5 ausführlich beschrieben. Wie im späteren Abschnitt über den Plasmaphasenübergang in Wasserstoff gezeigt wird, ist der Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit (hervorgerufen durch freie Elektronen: Ionisation) begleitet von einem Anstieg im Reflexionsvermögen. Wie dem rechten Bild von Abbildung 3.12 zu entnehmen ist, steigt das Reflexionsvermögen um 25 GPa stark an, sowohl in den Experimenten (Symbole) und den Vorhersagen aus DFT-MD-Rechnungen (durchgezogene Linien), die aus Simulationen mit 256 Teilchen, dem PBE-XC-Funktional und einem $4 \times 4 \times 4$ - \vec{k} -Punkt-Satz stammen. Insbesondere bei 808 nm stimmen Theorie und

Experiment hervorragend überein. Kleinere Abweichungen gibt es bei 532 nm, vor allem für den Anstieg bei Drücken > 25 GPa. Hier kann die Ursache wieder im Bandlückenproblem liegen, welches Dissoziation zu früh vorhersagt, denn bei höheren Drücken (wo auch im Experiment Dissoziation signifikant sein muss) stimmen bei 532 nm Theorie und Experiment sehr gut überein.

Zusammenfassend ist das Experiment zum Ionisationsgrad nicht nur wichtig um das Dissoziation-/Ionisationsverhalten von Wasserstoff/Deuterium entlang der Hugoniotkurve besser zu verstehen, sondern trifft auch Aussagen über das Innere von Jupiter, insbesondere über den Beginn des metallischen Bereichs. Dadurch werden die theoretischen Jupitermodelle in Kapitel 4, sowie Struktur- und Transportberechnungen mittels DFT-MD experimentell validiert.

3.4.2. Thomsonstreuung an dissoziierendem Wasserstoff

In einem sogenannten Pump-Probe-Experiment mit weicher Röntgenstrahlung am FEL in Hamburg (FLASH) wurde kryogener Wasserstoff jeweils mit einem FEL-Röntgenpuls (~ 92 eV, $\lambda = 13,5$ nm) angeregt und zeitversetzt ($0 \text{ ps} \leq \Delta t \leq 5 \text{ ps}$) mit einem Teil des gleichen Pulses untersucht^{327;328}. Dies wurde durch einen Strahlteiler realisiert, der einen FEL-Puls aufteilen und einen der beiden Strahlen verzögern kann. Gemessen wurde das Rayleigh-Streuspektrum¹⁰⁴ unter einem Streuwinkel von $\Theta = 90^\circ$, was zu einem Impulsübertrag von $k = 0,0348 a_B^{-1}$, also praktisch $k = 0$ führt. Der Strukturfaktor, der im Experiment direkt aus dem Streuspektrum folgt, kann also theoretisch in sehr guter Näherung über die Kompressibilitätsgleichung berechnet werden:

$$\frac{1}{N_{\text{inc}}} \frac{dN_{\text{scat}}}{d\Omega} = \frac{V n_i}{A} Z r_0^2 S(k \sim 0) = \frac{V n_i Z r_0^2}{A} n_i k_B T \kappa_T \quad . \quad (3.10)$$

Der linke Term ist die Anzahl der gestreuten Photonen N_{scat} pro Raumwinkel und Anzahl der einfallenden Photonen N_{inc} . Dies entspricht dem Strukturfaktor $S(k)$ gewichtet mit der Ionendichte n_i , dem Streuvolumen V , dem klassischen Elektronenradius r_0 und der bestrahlten Fläche A , sowie der Kernladungszahl $Z = 1$. Da $S(k)$ in diesem Experiment von dem ionischen Beitrag dominiert wird und $k \sim 0$ gilt, kann der Strukturfaktor auch über die Kompressibilitätsgleichung $S(k = 0) = n_i k_B T \kappa_T$ theoretisch aus DFT-MD-Simulationen berechnet werden.

Dazu wurden erstmals DFT-MD-Rechnungen eines Zwei-Temperatur-Systems durchgeführt. Die Temperatur der Elektronen T_e ist über die Fermiverteilung bestimmt und deutlich größer als die Ionentemperatur T_i , welche über den Nosé-Thermostaten festgelegt wird. Die höheren Temperaturen der Elektronen liegen an den kurzen Zeitskalen des Experiments (\sim ps), bei dem der Laser an die Elektronen koppelt und die Zeit zwischen Pumpen und Proben nicht für die Relaxation ins thermodynamische Gleichgewicht über Stöße ausreicht. Hervorzuheben ist hier, dass im Rahmen des DFT-Ansatzes trotzdem lokales thermodynamisches Gleichgewicht im Elektronensystem und im Ionensystem angenommen wird, da ansonsten eine Temperatur im Nichtgleichgewicht eines Systems nicht sauber definiert werden kann. Als weitere Details wurden in den Rechnungen wegen der geringen Dichte 64 Teilchen mit dem PBE-XC-Funktional und einem Energiecut-off der ebenen Wellen von 1400 eV am Baldereschi-Punkt simuliert.

Die Werte für T_e und T_i für verschiedene Verzögerungszeiten zwischen dem Pump-Puls und dem Probe-Puls Δt stammen aus Strahlungs-hydrodynamischen Simulationen mit dem HELIOS-Code²⁰⁶. Da es sich um isochores Erhitzen der Probe handelt, ist die Dichte des Systems $\rho = 0,08 \text{ g/cm}^3$ vom Ausgangszustand her bekannt.

Aus den Simulationen wurde dann die Paarverteilungsfunktion der Ionen $g_{ii}(r)$ bestimmt, die für ausgewählte Δt im linken Bild von Abbildung 3.13 zu sehen sind. Die schwarze Kurve ist die Referenzkurve für das vollständig molekulare Fluid bei 20 K mit dem Molekülpeak bei $r_{Mol} \sim 0,75 \text{ \AA}$. Mit steigendem Δt steigen die T_e erst bis 0,5 ps an um dann leicht zu fallen $T_e(5 \text{ ps}) = 1,9 \text{ eV}$. Die T_i jedoch steigen stetig mit Δt an, weil in längeren Zeiten mehr Stöße die Ionen aufheizen. Dieses Heizen führt sehr schnell zur Dissoziation der Moleküle, was man am stark sinkenden Molekülpeak mit steigender Ionentemperatur sieht, sowie das verschwinden der Fernordnung, was einen Übergang des Systems zum idealen Plasma andeutet.

Ein Konsistenztest der HELIOS-Rechnungen gegenüber den DFT-MD-Simulationen kann über die Equilibrierungszeit τ_{eq} vorgenommen werden³²⁸. Die Kollisionszeiten τ_{coll} der Elektron-Ion-Stöße kann durch den Fit der aus den DFT-MD-Rechnungen erhaltenen dynamischen Leitfähigkeiten ($\sigma(\omega)$, siehe Kapitel 5) an ein Drude-Modell gewonnen werden²⁵⁷. $\sigma(\omega)$ wurde hier mit dem HSE-Funktional^{131;132}

3. Hochdruckexperimente

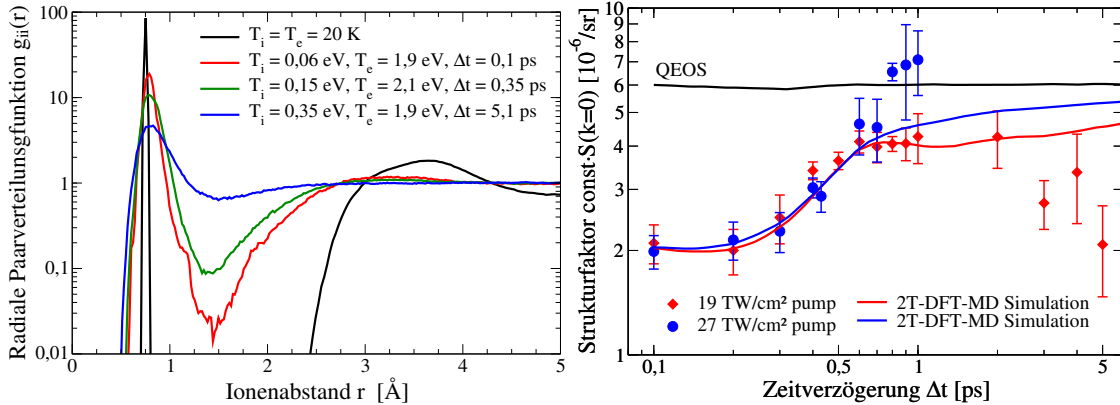


Abbildung 3.13.: Linkes Bild: Zu sehen sind radiale Paarverteilungsfunktionen $g_{ii}(r)$. Die vollständig molekulare Referenzkurve (schwarz) bei 20 K zeigt den Molekülpeak bei $r_{Mol} = 0,75$ Å [A6,A7]. Weitere Kurven zu unterschiedlichen Pump-Probe-Verzögerungszeiten Δt und damit einhergehenden Elektronen- (T_e) und Iontemperaturen (T_i), siehe Text, sind ebenfalls abgebildet. Rechtes Bild: Gewichteter Strukturformfaktor (vgl. mittlerer Term in Gleichung 3.10) aus dem Experiment mit je 19 TW/cm² (rote Diamanten) und 27 TW/cm² (blaue Kreise) pump-Laser-Intensität ist abgebildet mit den entsprechend farbcodierten Vorhersagen aus DFT-MD-Rechnungen (durchgezogene Kurven) und dem QEOS-Zustandsgleichungsmodell (schwarz) [A6,A7].

berechnet, welches die Bandlücke besser behandelt und damit adäquat insbesondere für dissoziierende Systeme ist. Es ergibt sich $\tau_{coll} = 1 - 3$ fs was zu Equilibrierungszeiten von $\tau_{eq} = m_p/(2m_e)\tau_{coll} = 1 - 3$ ps führt, die auch in HELIOS implementiert sind.

Der Strukturformfaktor $S(k = 0)$ wurde ebenfalls aus den DFT-MD-Simulationen über die Kompressibilitätsgleichung berechnet. Die Ergebnisse sind zusammen mit den experimentellen Daten, welche durch den linken und mittleren Term von Gleichung 3.10 gegeben sind, im rechten Bild von Abbildung 3.13 dargestellt.

In dieser Grafik stehen blaue Daten für die Experimente mit einer Intensität des Pump-Pulses von 27 TW/cm² und rote Daten für 19 TW/cm², während die durchgezogenen Linien Simulationsdaten zeigen und die Kreise und Diamanten Messpunkte sind. Offensichtlich zeigen die Vorhersagen mit dem QEOS-Modell (schwarze Linie, siehe auch Kapitel 2.2.3) keine Änderungen von $S(k)$ mit Δt und

sind somit zur Beschreibung des Experiments nicht geeignet.

Der Anstiegsverlauf von $S(k)$ bis zu $\Delta t = 0,7$ ps wird für beide Pump-Intensitäten sehr gut durch die DFT-MD-Ergebnisse beschrieben, während der nochmalige starke Anstieg der experimentellen Daten für die 27 TW/cm^2 um 1 ps nicht aus den theoretischen Vorhersagen hervorgeht. Diese sind zwar für die 19 TW/cm^2 -Daten noch bis 2 ps in perfekter Übereinstimmung mit dem Experiment, können dann aber den Abfall zu höheren Δt nicht reproduzieren. Anhand der DFT-MD-Daten sieht man wie schon bei der Paarverteilungsfunktion ein schnelles Aufbrechen der Molekülbindungen. Mit größeren Verzögerungszeiten Δt erhitzt sich durch Elektron-Ion-Stöße das Ionensystem weiter, sodass sich ein ideales Plasma ausbildet, was durch den relativ konstanten Verlauf des Strukturfaktors bei großen Δt angedeutet ist. Die Effekte, die zum Abfall von $S(k)$ in den Experimenten führen, wie die in der Publikation³²⁸ vorgeschlagene schnelle Rekombination der Ionen¹⁰⁵, sind bisher nicht vollständig verstanden.

3.5. Der Nichtmetall-Metall Übergang in Wasserstoff

Das letzte Experiment, welches in diesem Kapitel vorgestellt werden soll und über den ganzen Zeitraum der Promotion begleitet wurde, ist die experimentelle Bestimmung der Lage des Phasenübergangs erster Ordnung von molekularem, nichtleitendem Wasserstoff/Deuterium in das atomare, metallische Fluid (im Folgenden non-metal-to-metal transition: NMT). Die zugehörigen Experimente wurden im Rahmen des Z Fundamental Science Programs auf Antrag von Marcus Knudson und Ronald Redmer von Knudson und dem Z-Team an der Z-Maschine des Sandia National Laboratory durchgeführt. Auf der theoretischen Ebene wurden die Experimente vom Autor dieser Arbeit, Redmer und Desjarlais begleitet.

Der druckgetriebene NMT im Festkörper bei hohen Dichten wurde bereits vor 80 Jahren theoretisch vorhergesagt³²⁴ und ist somit eins der ältesten ungelösten Probleme in der Hochdruckphysik²¹⁴. Insbesondere für die Planetenphysik ist die Lage des NMT wichtig, da die Metallisierung von Wasserstoff in einer H-He-Mischung zur Entmischung des Systems führen kann¹⁹⁷, siehe Kapitel 2.5.

Historisch wurde der NMT auch zur Erklärung der Schichtengrenzen in Großen Planeten, siehe Kapitel 4, herangezogen. Jedoch zeigen das Experiment und DFT-MD-Rechnungen, die im Folgenden vorgestellt werden, dass der NMT bei tieferen Temperaturen und höheren Drücken als sie im Innern von beispielsweise Jupiter auftreten liegt, siehe auch Abbildung 2.3.

Modelle im chemischen Bild^{57;81;82;184;284} (Publikationen sind nur eine kleine Auswahl) sagen einen solchen dissoziationsgetriebenen Plasmaphasenübergang (PPT) im partiell ionisiertem Plasma voraus, mit thermodynamischen Größen am kritischen Punkt von $P_c < 1$ Mbar und $T_c > 15000$ K. Für weitere Ausführungen bezüglich dieser Modelle sei hier auf den Review-Artikel von Redmer und Holst²⁶⁴ verwiesen.

DFT-MD-Simulationen mit dem PBE-XC-Funktional^{196;230} bestimmen den NMT erstmals bei wesentlich tieferen Temperaturen und höheren Drücken im dichten Fluid mit kritischen Parametern von $T_c < 2000$ K und $P_c > 1$ Mbar, siehe Kurven von Lorenzen und Morales im Wasserstoffphasendiagramm in Abbildung 2.3.

Die Verwendung von nicht-lokalen XC-Funktionalen, wie dem HSE-Funktional¹³¹ oder dem vdW-DF2-Funktional¹⁸⁷, siehe Kapitel 2, verschieben die Koexistenzlinie zu höheren Drücken, wie in Abbildung 2.3 zu sehen (grüne Diamanten: HSE-Resultat¹⁹⁴, durchgezogene grüne Kurve: vdW-DF2-Resultat¹⁶⁷). Auch Quanteneffekte der Ionen, die in der vdW-DF2-Kurve mit berücksichtigt sind, können das Ergebnis zu kleineren Drücken schieben²²⁸. Theoretische Vorhersagen aus QMC-Rechnungen²¹³ verschieben die Koexistenzlinie nochmal um ~ 2 Mbar zu höheren Drücken. Die Ursache liegt vermutlich an dem Wechselwirkungspotential, welches mittels QMC bei $T = 0$ K berechnet und dann für Simulationen bei endlichen Temperaturen verwendet wurde. Eine ausführliche und kritische Auseinandersetzung mit diesen Ergebnissen steht noch aus.

Der offensichtliche Unterschied bei der Vorhersage der Lage des NMT durch Modelle im chemischen Bild und *ab initio*-Methoden stammt aus der konzeptionellen Behandlung des Vielteilchensystems. Die in Kapitel 2 diskutierten chemischen Modelle behandeln Elektronen, Protonen, Atome und Moleküle jeweils als eigenständige Teilchensorten und nutzen für die Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Sorten effektive Potentiale. Dieser Ansatz ist gerechtfertigt, solange man eindeu-

tig zwischen den Teilchensorten unterscheiden kann. Dies ist aber nicht mehr der Fall bei hohen Dichten. Unter diesen Bedingungen delokalisieren gebundene Elektronen durch Druckionisation (Mott-Effekt). Aus langlebigen Bindungszuständen (Atome, Moleküle) werden kurzzeitige Korrelationen zwischen den Elektronen und Ionen. Die Prämisse des chemischen Bildes gilt in diesem Fall nicht mehr. Die Korrelationen und Quanteneffekte unter solchen Bedingungen können hingegen konsistent mit den *ab initio*-Methoden beschrieben werden.

Auf experimenteller Seite wurde in reverberating shock wave-Experimenten (siehe Abschnitt 3.2) erstmals der kontinuierliche NMT um 1,5 Mbar und 3000 K gemessen^{240;320}. In diesem Bereich zeigt auch das Experiment von Fortov *et al.*⁹⁶, welches in diesem Kapitel schon ausführlich diskutiert wurde und dessen Drücke und Temperaturen berechnet sind, Hinweise auf einen Phasenübergang erster Ordnung. Dzyabura *et al.*⁷⁷ deuteten vermutlich bei 1,3 Mbar und 1600 K in Lasererhitzten Diamantstempelzellen die latente Wärme der Wasserstoffdissoziation als Zeichen für den NMT, siehe Abbildung 2.3. Jedoch wurde bis vor Kurzem weder im Fluid noch im Festkörper^{86;107;141;203;330} ein direkter experimenteller Nachweis für den NMT gefunden.

Wie am blau-schattierten Bereich in Abbildung 2.3 gezeigt, haben Knudson *et al.*¹⁶⁷ den NMT bei etwa 3 Mbar und unterhalb von 2000 K gemessen. Das experimentelle Design wurde so gewählt, dass die kryogenen Deuteriumproben erst entlang einer Hugoniotkurve komprimiert wurden und die Kompression bei moderaten Temperaturen unterhalb von 1400 K in eine isentrope ramp-compression überging, siehe Bild 1 in der Publikation [A3]. Damit konnten große Drücke bei moderaten Temperaturen erreicht und vor allem gemessen werden. Zusätzlich wurde das Reflexionsvermögen der Probe ermittelt, welche im Bereich des NMT abrupt anstieg. Dieser plötzliche Anstieg im Reflexionsvermögen geht mit einem entsprechenden Anstieg in der elektrischen Leitfähigkeit einher. Mikroskopisch gesehen stammt der Sprung aus der druckgetriebenen Dissoziation der Deuteriummoleküle, bei denen sich gleichzeitig unter diesen Bedingungen die Bandlücke schließt was zu einer hohen Leitfähigkeit führt. Dieser Effekt ist ein Phasenübergang erster Ordnung, da er ebenfalls mit einem Dichtesprung einhergeht.

Zur theoretischen Begleitung dieser Experimente wurden extensive DFT-MD-Datensätze für die Zustandsgleichung, die elektrische Leitfähigkeit und das Reflexi-

3. Hochdruckexperimente

onsvermögen erzeugt. Die Methodik zur Berechnung von optischen Eigenschaften mittels DFT-MD ist in Kapitel 5 beschrieben. In den Simulationen wurden 128 Deuteriummoleküle (256 Teilchen) mit dem vdw-DF2-XC-Funktional^{73;187;274;311} am Baldereschi-Punkt berechnet. Aus den konvergierten Läufen wurden für die optischen Eigenschaften je 40 Schnappschüsse generiert. Die Leitfähigkeit dieser Schnappschüsse wurde wieder mit dem vdw-DF2-XC-Funktional und einem Monkhorst-Pack-Satz von $4 \times 4 \times 4$ k -Punkten berechnet.

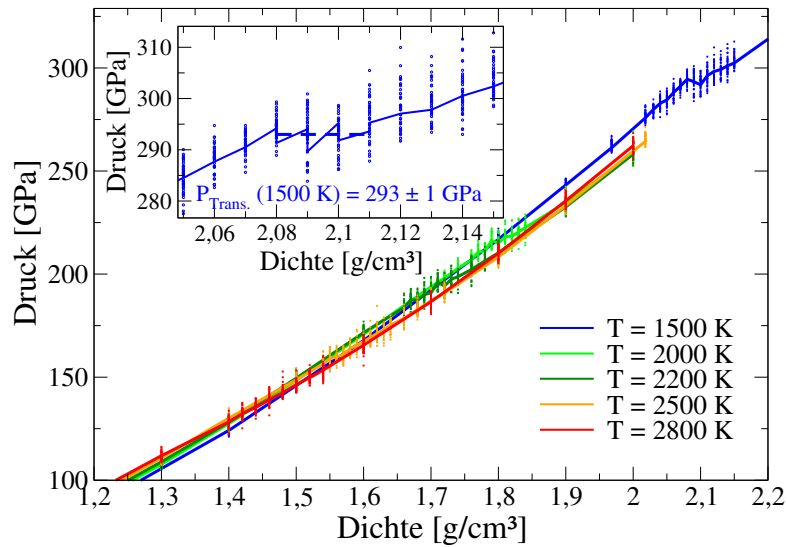


Abbildung 3.14.: Im Übergangsbereich vom molekularen zum atomaren System schneiden sich die Druckisothermen ($(\partial P/\partial T)_\rho < 0$) und unterhalb des kritischen Punktes kommt es zu einem Dichtesprung (blaue Kurve) [A3]. Kleine farbige Punkte entsprechen den Schnappschüssen in Abbildung 3.16.

Das Dichte-Druck-Temperatur-Gitter aller Simulationen ist in Abbildung 3.14 zu sehen, wo die entsprechenden Schnappschüsse als kleine farbige Punkte dargestellt sind. Da der Druck eines atomaren Systems bei gleicher Dichte und Temperatur kleiner ist als der des entsprechenden molekularen Systems und die Dissoziation bei höheren Temperaturen schon bei kleineren Dichten einsetzt, kommt es im Übergangsbereich zu sich überschneidenden Isothermen ($(\partial P/\partial T)_\rho < 0$). Die 2800 K-Kurve liegt ab $1,5 \text{ g/cm}^3$ unterhalb aller kälteren Isothermen um bei höheren Dichten ab $1,9 \text{ g/cm}^3$ bis auf die 1500 K alle anderen Isothermen im Druck wieder zu übersteigen. Bei denen ist dieses Verhalten ebenfalls systematisch mit

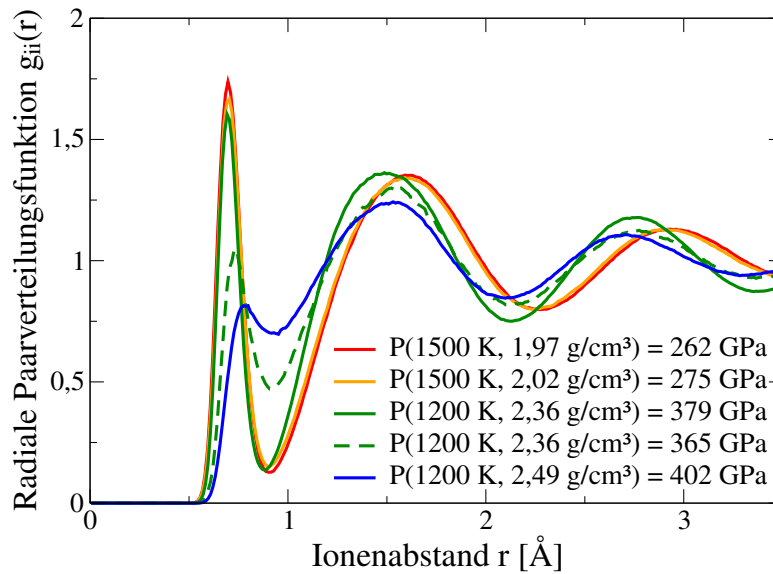


Abbildung 3.15.: Sprunghafter Übergang (grüne Kurven) eines molekularen in ein atomares System in der Paarverteilungsfunktion zusammen mit weiteren molekularen (rot und orange) und atomaren (blau) Kurven [A3].

höheren Dichten. Isothermen unterhalb des kritischen Punktes weisen bei einem Phasenübergang erster Ordnung einen Dichtesprung auf. Dieser ist für 1500 K im Inset zu sehen. Bei einem Übergangsdruck von $P(1500 \text{ K}) = 293 \pm 1 \text{ GPa}$ springt die Dichte um $0,03 \text{ g/cm}^3$. Dieser Sprung ist klein, typisch für einen flüssig-flüssig-Phasenübergang. Weiterhin ist 1500 K schon sehr nah an der kritischen Temperatur $T_c \sim 2000 \text{ K}$ und der Dichtesprung als Ordnungsparameter nimmt in der Nähe des kritischen Punktes sehr schnell ab.

Der abrupte Übergang vom molekularen ins atomare Fluid wird auch in der radialen Paarverteilungsfunktion sichtbar, siehe Abbildung 3.15. Während die rote und orange Kurve von der 1500 K-Isotherme noch einen eindeutigen Molekülpeak haben, zeigen die beiden grünen Kurven ein transientes Verhalten des Systems bei 1200 K und $2,36 \text{ g/cm}^3$. Es kann offensichtlich während der Simulation thermodynamisch abwechselnd einen molekularen (durchgezogene Kurve) und einen atomaren (gestrichelte Kurve) Zustand einnehmen. Vergleicht man die grüne und die blaue durchgezogenen Kurven, so wird der Übergang innerhalb von $0,13 \text{ g/cm}^3$ noch deutlicher.

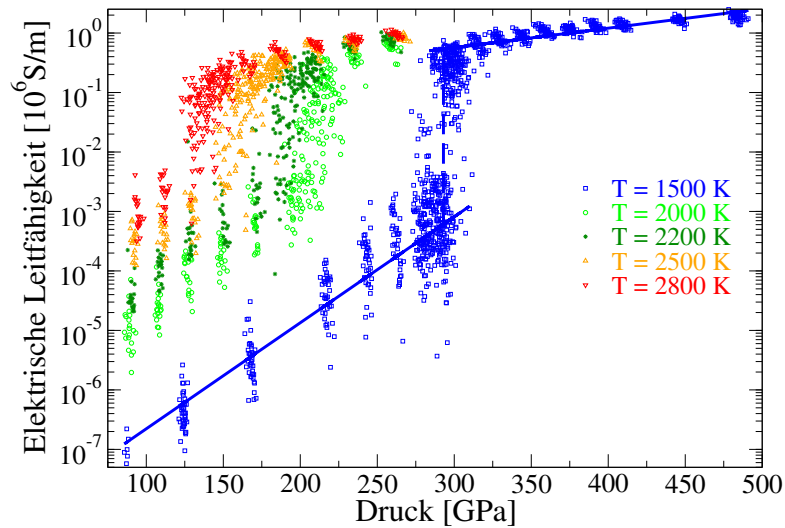


Abbildung 3.16.: Elektrische Leitfähigkeit σ entlang verschiedener Isothermen, siehe Legende. Der Sprung in der blauen Kurve zeigt den NMT bei 1500 K [A3].

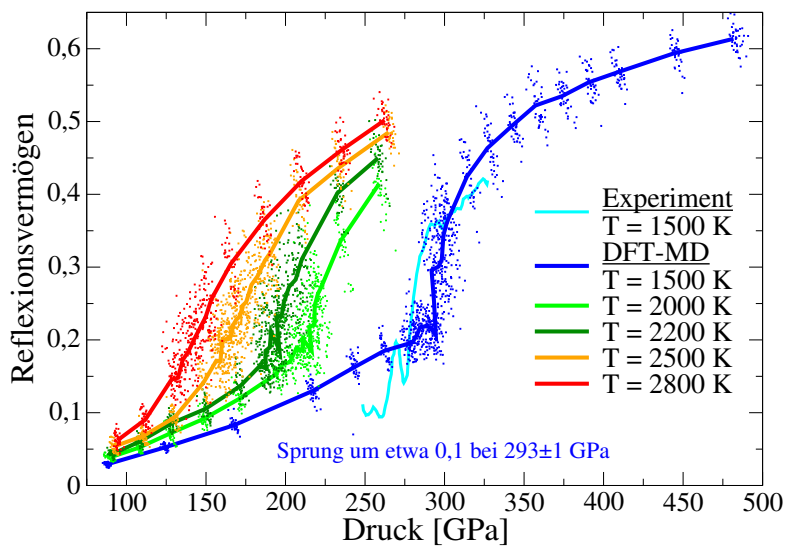


Abbildung 3.17.: Reflexionsvermögen von Deuterium aus dem Experiment für 1500 K (cyan) und DFT-MD-Ergebnisse für verschiedene Isothermen, siehe Legende. Wie im linken Bild ergeben sich die durchgezogenen Kurven aus Mittelung der Schnappschüsse (kleine Punkte) [A3].

Wie schon erwähnt ist der Phasenübergang erster Ordnung auch mit einem abrupten Sprung in der elektrischen Leitfähigkeit σ und damit auch im Reflexions-

vermögen verbunden. Da Letzteres nur Werte zwischen 0 und 1 annehmen kann ist der Übergang in σ über mehrere Größenordnungen deutlicher zu sehen, siehe Abbildung 3.16. Unterhalb der kritischen Temperatur springt σ bei 1500 K und 293 GPa um über drei Größenordnungen, wenn man die Regressionskurven als Referenzen nimmt. Solch ein deutlicher Sprung ist bei $T_c = 2000$ K und den höheren Temperaturen nicht mehr zu sehen, bei denen der Übergang dann offensichtlich kontinuierlich verläuft.

Dieses Verhalten sieht man auch beim Reflexionsvermögen (Abbildung 3.17). Für $T \geq T_c$ ist der Anstieg kontinuierlich, während bei 1500 K und 293 GPa ein Sprung von $\sim 0,1$ auftritt, in guter Übereinstimmung mit dem Experiment (cyan).

Das Experiment und die DFT-MD-Rechnungen legen es nahe, dass zur Beschreibung des NMT erster Ordnung das vdw-DF2-XC-Funktional adäquat ist. Zumindest sind Dispersionsbeiträge offensichtlich relevant. Dennoch kann man im direkten Vergleich mit den PBE-Resultaten die Unterschiede nicht direkt und ausschließlich den van-der-Waals-Effekten zuschreiben, da im vdw-DF2 die Dispersionskorrekturen nicht auf die XC-Energien des PBE-Funktional gerechnet werden³¹². Außerdem berücksichtigt das vdw-DF2-XC-Funktional nur Zwei-Teilchen-Dispersionsbeiträge. Eine Untersuchung des NMT mit einem Funktional, welches Vielteilchen-Dispersionbeiträge berücksichtigt⁷⁴, ist noch offen. Insbesondere für den metallischen Bereich ist die Formulierung von Dispersionsbeiträgen schwierig aber möglich³¹². Solch eine Formulierung als zusätzliche Dispersionenergie zu der PBE-XC-Energie ist Gegenstand einer beginnenden Zusammenarbeit der AG „Statische Physik“ mit Tkachenko vom FHI Berlin und wird wahrscheinlich zu einer Reanalyse der hier präsentierten Daten führen.

3.6. Zusammenfassung von Kapitel 3

In diesem Kapitel wurden die Zustandsgleichungen H-REOS.3 und He-REOS.3 an Experimenten getestet. Dabei reproduziert die Wasserstoffzustandsgleichung im Druck sowohl die 300 K-Isotherme, die verschiedenen Hugoniotkurven (unkomprimierte und vorkomprimierte Anfangszustände) sowie die reverberating shock-Experimente in der Umgebung der Jupiterisentrope. Wegen des Bandlückenpro-

blems des PBE-XC-Funktional wird jedoch die Temperatur-Druck-Relation entlang der Hugoniotkurven leicht unterschätzt [A8].

Im Fall von Helium wird der Bereich des Festkörpers bei 300 K von der He-REOS.3 im Druck überschätzt, das Verhalten im Gas und Fluid bei dieser Temperatur aber sehr gut reproduziert. Die aus der He-REOS.3 berechnete Hugoniotkurve stimmt bei kleineren Drücken sehr gut mit den Experimenten überein. Die experimentellen Ergebnisse für hohe Drücke stehen wegen des noch nicht verwendeten neuen Standards für die Quartz-EOS zur Diskussion und weichen bisher deutlich von den theoretischen Werten ab [A2].

Des Weiteren wurden quasi-isentrope Kompressionsexperimente für Deuterium und Helium nachgerechnet. Die auf diesem Weg dynamisch bestimmte Coldkurve, deren Druck und Dichte gemessen wurde, konnte sehr gut von der H-REOS.3 reproduziert werden. Für die Experimente von Mochalov *et al.* und Fortov *et al.*, welche von gasförmigen Deuterium starten und nur die Dichte des komprimierten Systems gemessen haben, wurde ein alternativer isentroper Kompressionspfad auf Basis der H-REOS.3 vorgeschlagen. Im Gegensatz zu den Vorhersagen aus den Hydrocodes verläuft diese sehr glatt und sagt einen maximalen Druck von 13 Mbar bei 3500 K statt 18 Mbar bei 3500 K voraus. Die Ergebnisse der He-REOS.3 bezüglich der isentropen Kompression von Helium weichen insbesondere in der Temperatur deutlich von den Hydrocode-Ergebnissen zu den gemessenen Dichten ab [A8].

Weitere Vorhersagen wurden auch für Experimente mit Thomsonstreuung gemacht. So konnte gezeigt werden, dass entlang der Hugoniotkurve von Deuterium der gemessene Ionisationsgrad mit den aus DFT-MD-Rechnungen bestimmten Dissoziationsgraden übereinstimmt. Ein neutraler atomarer Zustand zwischen dem molekularen und dem metallischen Fluid erscheint bei den thermodynamischen Bedingungen entlang der Hugoniotkurve damit unwahrscheinlich [A4].

In einem zweiten Thomsonstreu-Experiment an kryogenen Wasserstoff mit dem FLASH-Laser wurde die Dissoziation des Systems in weniger als einer Picosekunde gemessen. Die in diesem Kapitel diskutierten Zwei-Temperatur-DFT-MD-Rechnungen konnten dieses Verhalten bestätigen. Die Interpretation des abfallenden Streusignals bei höheren Verzögerungszeiten zwischen dem Pumpen des

Wasserstofftröpfchens und dem Proben bleibt jedoch noch offen [A6,A7].

Außerdem wurde mit DFT-MD-Simulationen unter Nutzung des vdw-DF2-XC-Funktional ein Experiment zur Bestimmung des druckgetriebenen Phasenübergangs erster Ordnung vom molekularem Deuterium zum metallischem System (NMT) begleitet. Diese Rechnungen finden die Koexistenzlinie unterhalb von 2000 K und bei Drücken zwischen 2,3 und 4 Mbar, viel höher als Vorhersagen mit dem PBE-XC-Funktional, siehe Abbildung 2.3. In dieser Gegend des Phasendiagramms finden auch die entsprechenden Experimente einen abrupten Anstieg im Reflexionsvermögen und damit starke Belege für den NMT. Es konnte damit gezeigt werden, dass für die theoretische Beschreibung des NMT mit der DFT-MD-Methode, Dispersionskräfte berücksichtigt werden müssen. Die Ergebnisse aus dem Experiment und den Simulationen scheinen das 80 Jahre alte Problem des NMT gelöst zu haben und wurden zur Veröffentlichung bei Science resubmitted.

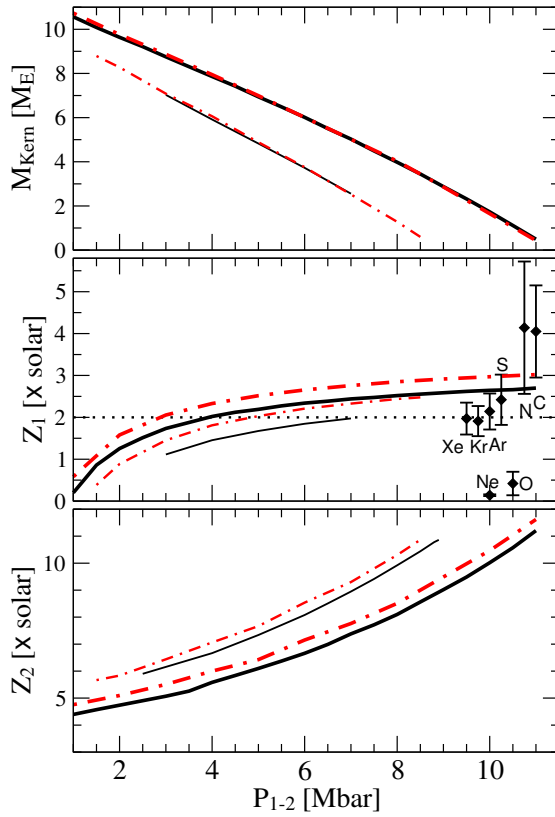
Abschließend soll noch einmal auf die Hugoniotexperimente Bezug genommen werden. Wie schon gesagt, reproduzieren die DFT-MD-Daten diese sehr gut, während die Zustandsgleichung von Saumon *et al.* (SCvH) deutlich höhere Kompressionsverhältnisse vorhersagt. Somit ist die H-REOS.3 zur Beschreibung der WDM besser geeignet. Die Unterschiede, die sich in der Modellierung Großer Planeten und Brauner Zwerge unter Verwendung der H-/He-REOS.3 bzw. der SCvH-EOS ergeben, sollen im folgenden Kapitel untersucht werden.

4. Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen für GPs und BDs

Im Kapitel 2 wurden die Zustandsgleichungen (EOS) für Wasserstoff und Helium vorgestellt, welche Hauptbestandteile der Großen Planeten (GPs) Jupiter und Saturn sowie von Braunen Zwergen (BDs) sind. Zusammen mit einer repräsentativen EOS für die Elemente schwerer als Helium (in der gängigen Literatur auch Metalle genannt) werden mit Hilfe der resultierenden linearen Mischungszustandsgleichung (LM-REOS) Modelle des inneren Aufbaus von Jupiter (Abschnitt 4.1) und Braunen Zwergen (Abschnitt 4.2) berechnet. Für die Großen Planeten wird Wasser^{101;246} für die Metalle verwendet, da es eine Verbindung aus Wasserstoff und dem in GPs relativ häufig auftretenden Sauerstoff ist. Außerdem ist die relative Häufigkeit von Wasser in Großen Planeten an sich repräsentativ für die anderer schwerer Elemente. Für den notwendigen Dichte-Temperatur-Bereich Brauner Zwerg ist solch eine Wasser-EOS nicht verfügbar, sodass mit einer Dichteskalierung der Helium-EOS um einen Faktor 4 eine synthetische Wasser-EOS generiert wurde, welche jedoch kompressibler als echtes Wasser ist.

4.1. Modellierung Großer Planeten (GPs): Das Drei-Schichten Modell

Modelle für den inneren Aufbau von Jupiter und Saturn haben eine jahrzehntelange Tradition^{57;115–117;144;219;243;246;333;334}. Diese Modelle sollten möglichst viele der experimentell zugänglichen Beobachtungsgrößen des Planeten erfüllen. Zu diesen



Beobachtungsgröße	Wert
Masse ¹¹⁸	$1,899 \times 10^{27}$ kg
Radius ¹¹⁸	71492 km
T_{eff}^{118}	124,4 K
$T_{1\text{bar}}$	170 K
Rotationsgeschwindigkeit	$2\pi/(9,925 \text{ h})$
Y_1^{315}	0,238
\bar{Y}^{11}	0,275
J_2^{118}	$1,4697 \times 10^{-2}$
$J_4^{46;118}$	$-5,89 \times 10^{-4}$
$J_6^{46;118}$	31×10^{-6}

Abbildung 4.2.: Kernmasse (oben), Metallizität im äußeren (Z_1 : Mitte) und inneren Mantel (Z_2 : unten) zusammen mit den verwendeten Werten für die Observablen von Jupiter [A2,A10].

Drei-Schichten Modell¹¹⁷ angenommen, das von Nettelmann in ein Programm²⁴¹ umgesetzt wurde, welches hier genutzt wird. Ein schematischer Aufbau dieses Modells ist in Abbildung 4.1 zu sehen (Jupiterbild aufgenommen vom Hubble Space Telescope und bereitgestellt von der NASA). Ein isothermer Gesteinskern (entsprechend der Zustandsgleichung von Hubbard und Marley¹⁴⁶) zu bestimmender Masse ist umhüllt von zwei adiabatischen Mänteln, welche sich in ihrer Zusammensetzung in der Häufigkeit von Wasserstoff (X), Helium (Y) und Wasser (Z) unterscheiden und am vorerst frei wählbaren Übergangsdruck P_{12} voneinander getrennt sind. Zwei Schichten im Mantel sind notwendig, da sowohl Jupiter als auch Saturn einen verminderten atmosphärischen Heliumgehalt verglichen mit dem protosolarem Wert haben, der Gesamtheliumanteil im Planeten jedoch dem protosolarem Wert von 0,275 entsprechen muss. Dies wird durch den entsprechen-

den Heliumanteil in der inneren Schicht realisiert. Die Isentrope und damit die thermodynamischen Zustände im Inneren des Planeten wird über die Temperatur bei dem 1-bar-Level ($T_{1\text{bar}}$) festgelegt, welche für Jupiter 170 K ist. Dazu muss über ein gegebenes Atmosphärenprofil¹⁰⁹ $T_{1\text{bar}}$ aus der effektiven Temperatur (T_{eff}) des Planeten berechnet werden^{119;145;241;283;286}. T_{eff} ist die Temperatur eines hypothetischen schwarzen Strahlers, dessen Strahlungsintensität identisch mit der des entsprechenden Planeten ist. Die Isentrope selbst kann unter Verwendung einer gegebenen thermischen und kalorischen Zustandsgleichung über eine Differentialgleichung berechnet werden (siehe Gleichung 4.4) oder mittels eines Integrationschemas über die Freie Energie^{241;243}. Unterschiede zwischen den Methoden ergeben sich vor allem aus Inkonsistenzen in den verwendeten Zustandsgleichungen, siehe Abschnitt 2.4. Zu dem vorgegebenen Übergangsdruck P_{12} werden die Metallizitäten Z_1 und Z_2 so in den adiabatischen Schichten umverteilt, dass die Gravitationsmomente getroffen werden²⁴⁵. Das Helium wird ebenfalls so verteilt, dass es über den Planeten einen Massenanteil von 27,5%¹¹ hat. In der äußersten Schicht muss der von der Galileo Entry-Probe gemessene Heliumgehalt von 23,8%³¹⁵ reproduziert werden. Die verwendeten Beobachtungsgrößen sind in der Tabelle im rechten Teil von Abbildung 4.2 zu sehen. Hinzu kommt noch die Metallizität im äußeren Mantel Z_1 , die mindestens zweimal dem solaren Wert von $Z_{\odot} = 1,5\%$ ¹⁹¹ bezüglich den Edelgasen Xenon, Argon und Krypton und dreimal Z_{\odot} im Hinblick auf Kohlenstoff und Stickstoff beträgt. Insbesondere Jupitermodelle, die mit Hilfe von LM-REOS.1²⁴⁶ berechnet wurden, hatten keinen akzeptablen Wert für Z_1 . Die Verwendung von LM-REOS.2 (enthält eine verbesserte Wasserstoff-EOS)²⁴³ führte dann zu $Z_1 \leq 2,5Z_{\odot}$ für Übergangsdrücke $P_{12} > 4$ Mbar, siehe dicke schwarze Linien in der Mitte von Abbildung 4.2. Eine zusätzlich verbesserte Helium-EOS in der LM-REOS.3¹⁸ führte dann auf $2Z_{\odot} \leq Z_1 \leq 3Z_{\odot}$ bei $3\text{ Mbar} \leq P_{12} \leq 11\text{ Mbar}$ (dicke rote Linien in Abbildung 4.2). Nun konnte auch die Anreicherung von Kohlenstoff getroffen werden, welches mit das häufigste schwere Element in Jupiter ist. Eine Erklärung für die größeren Werte von Z_1 bei den LM-REOS.3-Modellen im Vergleich mit denen auf Basis der LM-REOS.2 ist folgende: Die Gravitationsmomente, welche durch die Verteilung von Z_1 und Z_2 reproduziert werden, sind am empfindlichsten bei einigen Mbars (J_2) bzw. bei einem Mbar (J_4)^{118;241}. Die weniger kompressible He-REOS.3 führt dazu, dass mehr schwere Elemente zur

Mischung zugefügt werden müssen, um die gleiche Massendichte zu erhalten, die durch die Gravitationsmomente bedingt sind. Das gleiche Argument gilt bei der Verbesserung der Wasserstoff-EOS von LM-REOS.1 auf LM-REOS.2.

Auffällig im oberen Bild der Abbildung 4.2 ist das Verschwinden der Kernmasse mit wachsendem P_{12} . Jupitermodelle ohne Kern sind durchaus begründbar, wobei ein relativ kleiner Kern von wenigen Erdmassen wahrscheinlicher ist. Zum einen könnte sich ein anfangs großer Kern im ihn umgebenden metallischem Wasserstoff auflösen, worauf *ab initio*-Simulationen hinweisen³²⁵. Zum anderen könnte ein Jupiter ohne Kern sich nicht durch Kernakkretion in der protoplanetaren Scheibe gebildet haben^{189;259}, sondern durch eine gravitative Scheibeninstabilität^{33;211}. Wie schon erwähnt wird in dieser Arbeit ein Jupiter mit kleinem Kern favorisiert, da sehr hohe Übergangsdreie schwer zu begründen sind. Kleine Übergangsdreie können physikalisch mit einer Entmischung von Wasserstoff und Helium gerechtfertigt werden, worauf die geringeren Y_1 im Jupiter und vor allem im Saturn hinweisen. Diese Entmischung^{195;197} tritt in Saturn bei einem Druck von einem Mbar und vermutlich auch in Jupiter bei wenigen Mbar auf, siehe Kapitel 2.5.

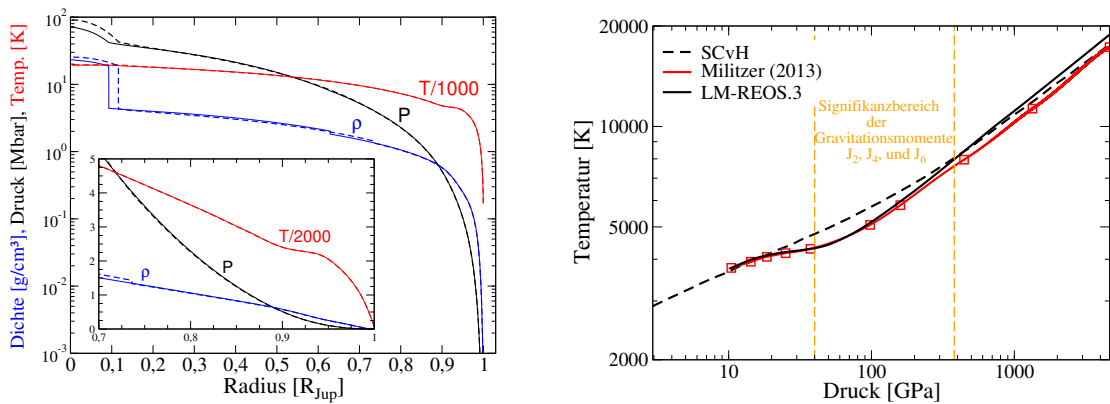


Abbildung 4.3.: Linkes Bild: Druck, Dichte und Temperatur von Jupitermodellen mit einem Übergangsdruck von 4 Mbar (gestrichelt) und 8 Mbar (durchgezogen) [A2,A9,A10]. Rechtes Bild: Jupiterisentrope für eine reale H-He-Mischung^{217;218} und lineare Mischungen mit LM-REOS.3¹⁸ und SCvH-EOS²⁸⁴.

Im linken Bild von Abbildung 4.3 sind die Druck-, Dichte- und Temperaturverläufe im Inneren von Jupiter für Übergangsdreie von 4 Mbar (gestrichelt) und

8 Mbar (durchgezogen) zu sehen. Druck und Temperatur sind stetige Funktionen, während die Dichte an den Schichtengrenzen und am Kern aufgrund der unterschiedlichen Zusammensetzung, insbesondere am Kernrand beim Übergang vom fluiden H-He-dominierten Mantel zum festen Gesteinskern, einen Sprung aufweist. Beide Modelle sagen für den Kernrand einen Druck von etwa 40 Mbar bei einer Temperatur von 20000 K und einer Dichte von 5 g/cm^3 voraus. Auffällig ist das Abflachen der Temperatur bei etwa 0,9 Jupiterradien. Wie in Kapitel 5 gezeigt wird, liegt das an der Dissoziation der Wasserstoffmoleküle, sodass hier latente Wärme zum Aufbrechen der Molekülbindungen das flache Temperaturprofil verursacht. Im weiteren Verlauf steigt die Temperatur bis zum Kernrand nicht mehr stark an, da die thermodynamischen Eigenschaften zunehmend durch das entartete Elektronengas dominiert sind.

Zum Ende dieses Kapitels soll noch kurz auf den alternativen Ansatz zur linearen Mischungszustandsgleichung eingegangen werden. Eine Jupiterisentropie aus einer realen H-He-Mischung (siehe auch Abschnitt 2.5) von Militzer und Hubbard²¹⁸ ist im rechten Bild von Abbildung 4.3 zu sehen. Sie wurde für eine H-He-Mischung mit $Y = 0,2466$ und einem Startpunkt mit $P(3770 \text{ K}) = 10,44 \text{ GPa}$ berechnet. Dieser Punkt liegt auf einer SCvH-Jupiterisentropen, da die realen Mischungsdaten auch nicht zu Dichten $\rho \ll 0,1 \text{ g/cm}^3$ mit DFT-MD gerechnet werden können. Ein voll konvergiertes Jupitermodell basierend auf dieser Isentrope steht noch aus, sodass hier nur mit ihr verglichen werden kann. Die LM-REOS.3-Kurve sagt etwas höhere Temperaturen vorher, jedoch weicht sie in dem Gebiet zwischen 0,4 und 4 Mbar, in dem die Gravitationsmomente reproduziert werden, um maximal 4 % von der realen Mischung ab. Dieser Unterschied wächst monoton bis auf 9 % bei 40 Mbar an. Die genannten Differenzen sind eher klein und werden somit nicht zu deutlich unterschiedlichen Ergebnissen, wie z.B. einer Kernmasse von ~ 20 Erdmassen²¹⁹ führen können.

4.2. Modellierung Brauner Zwerge (BDs): Das Ein-Schicht Modell

Braune Zwerge entstehen wie Sterne aus der Fragmentation einer Gaswolke, sodass sie keinen festen Kern wie z.B. Jupiter haben. Da man außer Masse, Radius und eventuell auch dem Spektrum wenig Beobachtungsdaten von diesen Objekten hat, wird im Folgendem angenommen, dass Braune Zwerge aus einer einzigen Schicht bestehend aus Wasserstoff, Helium und schweren Elementen modelliert werden können, siehe Abbildung 4.4. Als Mitglieder der Spektralklassen L, T und Y sind Braune Zwerge auch voll konvektiv und somit ist das Temperaturprofil im Modell adiabatisch. Auch wenn BDs sehr schnell rotieren ($2\pi/\omega \sim 4 \text{ h}^{16}$), sind sie so kompakt, dass Zentrifugalkräfte keine signifikanten Auswirkungen auf den inneren Druckverlauf haben. Deshalb werden für das Modell des inneren Aufbaus von Braunen Zwergen nur folgende Differentialgleichungen gebraucht:

$$\frac{dP}{dr} = -\frac{Gm(r)\rho(r)}{r^2}, \quad (4.2)$$

$$\frac{dm}{dr} = 4\pi r^2 \rho(r), \quad (4.3)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_S = \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_\rho. \quad (4.4)$$

Das sind in dieser Reihenfolge das hydrostatische Gleichgewicht, die Massenverteilung innerhalb einer Kugelschale, sowie die Gleichung für das adiabatische Temperaturprofil. G ist dabei die Gravitationskonstante und die Lagrange-Koordinate m ist die Masse innerhalb einer Kugel der Dicke r . Diese Gleichungen werden mit einem Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung zu einem Objekt mit gegebener Masse M und Radius R gelöst. Dabei müssen die Randbedingungen $r(0) = 0$, $m(0) = 0$ und $r(M) = R$ erfüllt sein. Die Startbedingung der Isentrope muss aus einem Temperaturprofil für die Atmosphäre ermittelt werden, siehe rechtes Bild in Abbildung 4.4. Neben Braunen Zwergen sollen im Folgenden auch massereiche Große Planeten (MGP: $M \sim 10 M_{\text{Jup}}$) untersucht werden. Da es ein überlappendes Massenregime zwischen Braunen Zwergen und MGPs gibt^{127;250}, wird wegen der besseren Vergleichbarkeit auch für diese Planetenklasse ebenfalls ein homogenes Ein-Schicht-Modell wie bei den BDs angenommen.

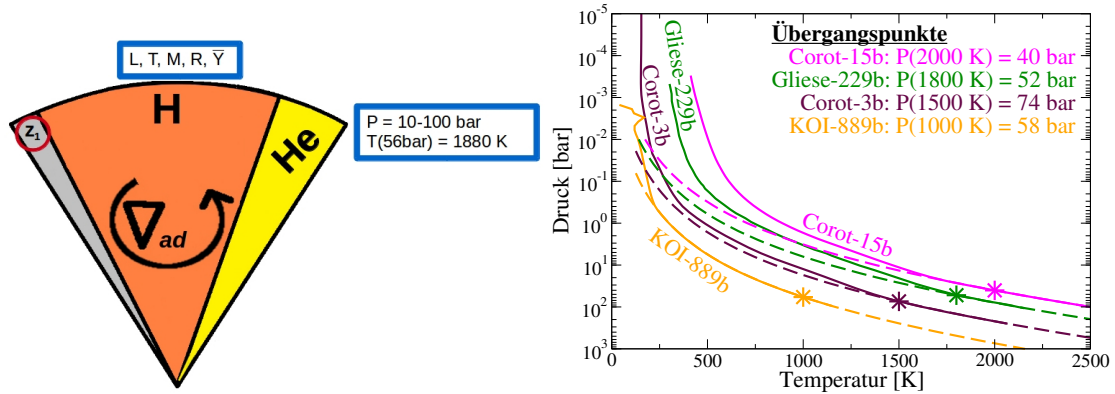


Abbildung 4.4.: Links: Das Modell für Braune Zwerge besteht aus einer adiabatischen Schicht aus H, He und schweren Elementen. Die atmosphärische Anfangsbedingung P_{at} für die Isentrope stammt aus Atmosphärenprofilen (rechtes Bild). Die Sterne zeigen die Lage von P_{at} in den einzelnen Objekten. Druck und der Anstieg der Kurven des Atmosphärenmodells und der Isentrope stimmen an diesen Punkten überein [A2].

Dank vieler Einzelbeobachtungen, aber auch wegen der Weltraumteleskope Kepler³² und Corot^{3;10}, gibt es neben einigen MGP auch unter den ~ 1300 bekannten Braunen Zwergen¹ mehrere mit bekannter Masse und bekanntem Radius. Die MGPs KOI-889b¹²⁴ und WASP-18b²¹⁰ sind im Masse-Radius-Diagramm (Abbildung 4.5) zu sehen sowie die folgenden Braunen Zwerge: Corot-3b⁶⁸, Corot-15b³⁵, WASP-30b⁸, KOI-205b⁷⁸, Kepler-39b³⁴ und LHS-6343c¹⁵⁵. Ebenfalls dargestellt sind zwei Vorhersagen für die Masse und den Radius des 1995 ersten zweifelsfrei nachgewiesenen Braunen Zwergs Gliese-229b²³⁴ von Marley *et al.*²⁰⁸ und Allard *et al.*⁶. Sehr junge Braune Zwerge, wie zum Beispiel das System 2MASS J05352184–0546085 im Orionnebel, welches ca. eine Million Jahre alt ist^{134;252} und aus zwei Braunen Zwergen besteht²⁹⁸, können hier nicht gezeigt und in unserem Modell nicht berechnet werden. Aufgrund ihres Alters sind sie noch im gravitativen Kollaps und etwa halb so groß wie die Sonne jedoch mit nur 1/20 bzw 1/30 der Sonnenmasse. Um diese Objekte zu beschreiben braucht man Evolutionsmodelle welche auch Kernfusionsreaktionen (Deuterium- und auch Lithiumfusion) mit berücksichtigen^{14;79}, wie sie in der frühen Entstehungsphase Brauner Zwerge auftreten^{16;26;43;224}.

Ziel dieser Arbeit ist es jedoch, den Einfluss der verwendeten Zustandsgleichungen auf den inneren Aufbau von MGPs und Braunen Zwergen im hydrostatischen Gleichgewicht zu untersuchen. Deshalb stehen in den kommenden Abschnitten der massereiche Große Planet KOI-889b, sowie die Braunen Zwerg Gliese-229b, Corot-3b und Corot-15b im Fokus, da ihre Massen nahezu den ganzen Bereich der Braunen Zwerg abdecken, siehe Tabelle 4.1.

Tabelle 4.1.: Beobachtungsdaten der untersuchten MGPs und Braunen Zwerg. *Der Radius und die Masse für Gliese-229b sind aus Marley *et al.*²⁰⁸ und die entsprechende Metallizität (Fe/H) aus Schiavon *et al.*²⁸⁷

Objekt	Masse (M_J)	Radius (R_J)	Fe/H
KOI-889b ¹²⁴	$9,98 \pm 0,5$	$1,03 \pm 0,06$	$-0,07 \pm 0,15$
Corot-3b ⁶⁸	$21,66 \pm 1$	$1,01 \pm 0,07$	$-0,02 \pm 0,06$
Corot-15b ³⁵	$63,3 \pm 4,1$	$1,12^{+0,3}_{-0,15}$	$0,1 \pm 0,2$
Gliese-229b*	$46,2^{+11,8}_{-14,8}$	$0,87^{+0,11}_{-0,07}$	$-0,2 \pm 0,4$

4.3. Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen

Braune Zwerg und Große Planeten haben in der Regel zirkulierende und molekül-dominierte Atmosphären, welche in Abhängigkeit von der Temperatur auch stark staubbelastet sein können, siehe Kapitel 1. Eine ausführliche Darstellung dieser komplexen Physik ist nicht Bestandteil dieser Arbeit und kann in den entsprechenden Review-Artikeln^{13;16;42;292;332} nachgelesen werden. Für realistische Atmosphärenprofile benötigt man gemessene Emissionsspektren der Objekte, welche aber nur für wenige verfügbar sind. Für Gliese-229b wurden diese gemessen, jedoch sind die Masse und der Radius nur schlecht bekannt^{6;208;249;285}, da für diesen Braunen Zwerg noch keine Transit- oder Radialgeschwindigkeitsmessung möglich war. Für Gliese-229b nutzen wir im Folgenden das Atmosphärenprofil von Marley *et al.*²⁰⁸, welches als grüne Linie im rechten Bild von Abbildung 4.4 zu sehen ist. Da in dieser Arbeit der Einfluss der Zustandsgleichungen untersucht werden soll, werden mangels vorhandener Spektren für KOI-889b, Corot-3b und Corot-15b vereinfachte Annahmen für die Atmosphäre, welche die äußere Randbedin-

gung der Strukturmodelle definiert, getroffen. Auch wenn diese Objekte teilweise sehr nah an ihrem Mutterstern sind (siehe Abbildung 1.2) wird dessen einfallende Strahlung vernachlässigt und ihr Alter auf fünf Milliarden Jahre gesetzt. Mit der vorgegebenen gemessenen Masse werden dann die Effektivtemperaturen (T_{eff}) aus den Evolutionsmodellen von Baraffe *et al.*¹⁵ extrahiert. Mit diesen Temperaturen und den gemessenen Fallbeschleunigungen an der Oberfläche wird das Temperaturprofil des Objektes aus dem Strahlungs-Konvektions-Atmosphärenmodell nach Marley *et al.*²⁰⁸ und Fortney *et al.*⁹⁴ berechnet. Diese Profile sind ebenfalls im rechten Bild von Abbildung 4.4 zu sehen. Die durchgezogenen Linien zeigen die Temperaturverläufe in der Atmosphäre, während die gestrichelten Linien Adiabaten sind, welche das Temperaturprofil im Inneren des Objektes darstellen. Die Sterne zeigen die $P - T$ -Punkte, an denen die Werte und die Anstiege der entsprechenden Kurven gleich sind. Dies sind die Übergangspunkte von der Atmosphäre zum Inneren, deren Druck (P_{at}) und Temperatur die Startbedingung für die Isentropendifferentialgleichung (Gleichung 4.4) sind, siehe Abschnitt 4.2. Für Corot-15b ergibt sich $P(2000 \text{ K}) = 40 \text{ bar}$, für Gliese-229b $P(1800 \text{ K}) = 52 \text{ bar}$, für Corot-3b $P(1500 \text{ K}) = 74 \text{ bar}$ und für KOI-889b $P(1000 \text{ K}) = 58 \text{ bar}$.

Als erstes wird der Einfluss der Zustandsgleichung anhand von Masse-Radius-Relationen für homogene, adiabatische Objekte untersucht. Für Gliese-229b-artige Randbedingungen ($P(1800 \text{ K}) = 52 \text{ bar}$, $Y = 27 \%$, $Z = 2 \%$) wird unter Verwendung der LM-REOS.3 und der SCvH-EOS ein breiter Massenbereich vorgegeben und entsprechend dem Modell (Gleichungen 4.2 bis 4.4) der zugehörige Radius ermittelt. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.5 zu sehen (durchgezogen: LM-REOS.3, gestrichelt: SCvH-EOS). Die Verwendung von LM-REOS.3 führt zu systematisch größeren Radien mit einer maximalen Abweichung zu der SCvH-Kurve von 6% bei einer Jupitermasse. Für den Massenbereich $M > 20 M_J$ bleibt der Unterschied nahezu konstant bei 2,5%. Dieses Ergebnis stimmt mit dem von Militzer und Hubbard²¹⁸ überein, die mit ihrer realen Mischungs-EOS ebenfalls etwas größere Radien erhalten als mit der SCvH-EOS für Planeten zwischen 0,5 und $2 M_J$. Diese Aussage kann nun bis $70 M_J$ erweitert und direkt über die Zustandsgleichung interpretiert werden: Die größten Unterschiede zwischen der LM-REOS.3 und der SCvH-EOS sind im Bereich der warmen, dichten Materie (WDM), in dem starke Korrelationen und Quanteneffekte wichtig sind und Dissoziations- und Io-

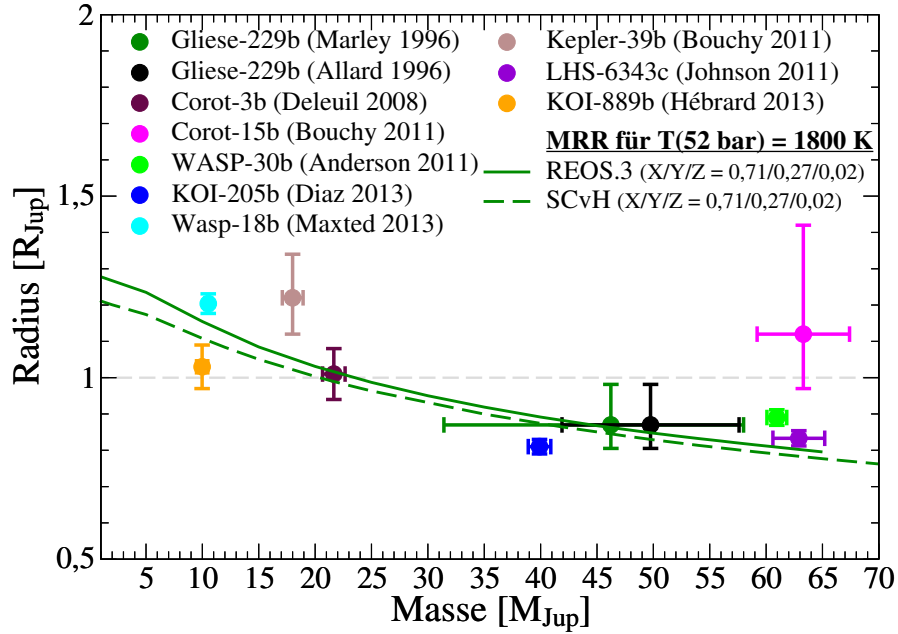


Abbildung 4.5.: Linkes Bild: Masse-Radius-Relationen für Objekte mit Gliese-229b-artigen Randbedingungen auf Basis von LM-REOS.3 (durchgezogen) und SCvH-EOS (gestrichelt) zusammen mit repräsentativen MGPs und Braunen Zwergen [A2].

nisationsprozesse (auch simultan) auftreten. Die DFT-MD-Zustandsgleichung ist hier nicht so kompressibel. Das kann man an der vorkomprimierten Hugoniotkurve für Wasserstoff in Kapitel 3 sehen, bei der die SCvH-EOS ein deutlich größeres Kompressionsverhältnis vorhersagt. Da das Innere von Planeten um eine Jupitermasse von WDM dominiert ist, führt die kompressiblere SCvH-EOS zu kleineren Radien als die LM-REOS.3. Bei größeren Massen steigen auch die Temperaturen und vor allem die Dichten im Innern der Objekte. Die Materie ist hier vollständig ionisiert und entartet mit steigender Dichte zunehmend. Diese Physik ist durch beide Zustandsgleichungen sehr gut beschrieben und führt zu ähnlichen Masse-Radius-Relationen.

Als Nächstes soll der Metallgehalt (Z) von Gliese-229b, Corot-3b, KOI-889b und Corot-15b bestimmt werden. Dazu wird der Z -Anteil in der Mischungszustandsgleichung so variiert, dass das entsprechende Strukturmodell zu gegebenen Randbedingungen (Masse, P_{at}) den Mittelwert vom Radius (siehe Tabelle 4.1) repro-

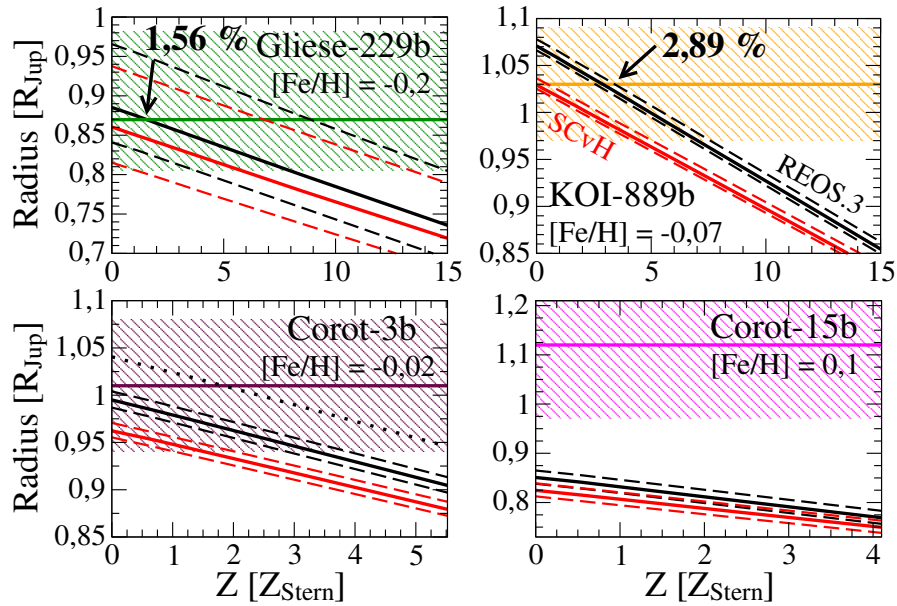


Abbildung 4.6.: Radius von Gliese-229b, Corot-3b, KOI-889b und Corot-15b in Abhängigkeit von der gewählten Zustandsgleichung (gestrichelt: SCvH-EOS, durchgezogen: LM-REOS.3) und der Metallizität des jeweiligen Objekts (siehe Text) [A2].

duziert. Da man mit der SCvH-EOS schwere Elemente nur mit einer skalierten Helium-Zustandsgleichung abbilden kann, wird auch in der LM-REOS.3 eine entsprechend skalierte He-EOS genutzt ($\rho_Z(P, T) = 4 \times \rho_{\text{He}}(P, T)$, $u_Z(P, T) = u_{\text{He}}(P, T)/4$). Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Metallizitäten sind auf die des jeweiligen Muttersterns normiert, welche durch das Fe/H-Verhältnis gegeben sind. Der Fe/H-Wert ist ein logarithmisches Maß, welches den Metallgehalt eines Sterns mit dem der Sonne vergleicht. Der Wert von -0,2 bei Gliese-229b bedeutet, dass der Mutterstern Gliese-229a eine Metallizität von $10^{-0,2} \sim 0,6$ des solaren Wertes hat.

Die bunten horizontalen Linien in den einzelnen Bildern von Abbildung 4.6 zeigen den mittleren Radius an, der getroffen werden soll, während die schattierten Regionen den Fehlerbalken im Radius abbildet, siehe Tabelle 4.1. Die durchgezogenen schwarzen $R - Z$ -Kurven (roten Kurven) repräsentieren die Ergebnisse für den Massenmittelwert für die LM-REOS.3 (SCvH-EOS), während die unteren (oberen) gestrichelten Linien Ergebnisse für die oberen (unteren) Fehlergrenzen

der gemessenen Massen sind.

Für alle Objekte findet man größere Radien mit der LM-REOS.3. Für Gliese-229b schneidet die LM-REOS.3-Kurve den mittleren Radius bei $Z = 1,56\%$. Die SCvH-Radien haben keine Lösung für den Mittelwert, liegen aber innerhalb der schattierten Region (Fehlerbalken). Wegen der großen Fehlerbalken in der Masse überlappen sich die Lösungen für beide Zustandsgleichungen und für die kleinste Masse kann man Metallizitäten bis $Z = 9\%$ finden. Für die verbleibenden drei Objekte ist die Genauigkeit der Metallgehalte an die einfache Wahl der atmosphärischen Randbedingungen gebunden, jedoch sind die Tendenzen eindeutig. Im Fall von KOI-889b finden wir disjunkte Lösungen bezüglich der verwendeten Zustandsgleichung. Das LM-REOS.3-Ergebnis von $Z \sim 3\%$ für die Mittelwerte von Masse und Radius ist wieder etwas größer als das der SCvH-EOS. Die Kurven für Corot-3b sind ebenfalls disjunkt. An diesem Beispiel ist die Abhängigkeit von der atmosphärischen Randbedingungen gut zu sehen. Für die gewählte Bedingung von $P(1500 \text{ K}) = 74 \text{ bar}$ findet man keine Lösung für den mittleren Radius. Jedoch mit der etwas anderen Gliese-229b-artigen Startbedingung von $P(1800 \text{ K}) = 52 \text{ bar}$ erhält man mit der LM-REOS.3 eine Metallizität von $Z \sim 2\%$ (gepunktete Linie im Corot-3b-Bild), wie es sich in der Masse-Radius-Relation in Abbildung 4.5 schon andeutete. Die zukünftige Messung und Verwendung genauerer Atmosphärenprofile für Corot-3b könnte diese Diskrepanz beseitigen.

Im Fall von Corot-15b findet man für beide Zustandsgleichungen keine Lösungen, weder für den Mittelwert noch für die Fehlerbalken des Radius. Dieser Braune Zwerg ist sehr groß im Vergleich zu ähnlich massereichen Objekten wie WASP-30b und LHS-6343c, siehe Abbildung 4.5. Solch eine Größe kann erklärt werden, wenn man ein jüngeres Alter annehmen würde (da Braune Zwerge mit der Zeit kontrahieren) und/oder die innere Struktur mit besseren Evolutionscodes berechnet, die strahlungsundurchlässigere (optisch Dichte) Atmosphären annehmen, die die Abkühlung verlangsamen und somit auch die Kontraktion des Objektes. Burrows⁴² kann so diesen großen Radius von Corot-15b erklären, welcher aber hier in den folgenden Betrachtungen nicht mehr berücksichtigt wird.

Mit Kenntnis der Metallgehalte sollen zum Schluss Druck-, Temperatur- und Dichteverläufe im Innern von Gliese-229b und Corot-3b (jeweils mit $Z = 2\%$) und von KOI-889b (mit $Z = 2\%$) zu gegebener Masse, Radius, Heliumgehalt ($Y = 0,27$)

4. Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen für GPs und BDs

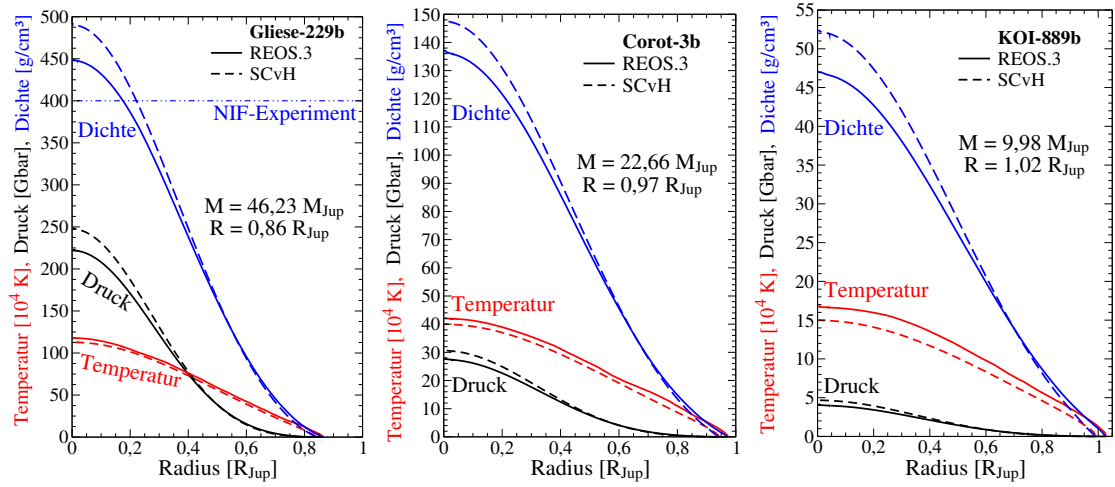


Abbildung 4.7.: Strukturmodelle für Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b in Abhängigkeit von der gewählten Zustandsgleichung (gestrichelt: SCvH-EOS, durchgezogen: LM-REOS.3) [A2].

und entsprechenden Atmosphärenbedingungen (siehe oben) vorgestellt werden. Die Profile sind in Abbildung 4.7 zu sehen. Alle Bilder enthalten Temperaturverläufe in Einheiten von 10 kK (rot), Druckprofile in Gigabar (schwarz) und Dichtekurven (blau) für LM-REOS.3 (durchgezogen) und die SCvH-EOS (gestrichelt). Je schwerer ein Objekt ist, desto größere Drücke, Dichten und Temperaturen hat es im Inneren. Die höchsten Werte erreicht demnach Gliese-229b im Zentrum mit $P_c \sim 220$ Gbar, $T_c \sim 1,1$ Mio. K und einer Dichte von $\rho_c = 450$ g/cm³ während der MGP KOI-889b die kleinsten Werte von $P_c \sim 4$ Gbar, $T_c \sim 170$ kK und einer Dichte von $\rho_c = 47$ g/cm³ aufweist. Während für die ausgewählten Braunen Zwerge und den MGP die Temperaturen für beide verwendeten Zustandsgleichungen ähnlich sind, ist der von der SCvH-EOS vorhergesagt Druck um $\sim 10\%$ größer als der von LM-REOS.3. Hier wird die typische Eigenschaft entarteter Materie deutlich, wo der Druck im Wesentlichen von der Dichte abhängt und nicht von der Temperatur. Die höheren Drücke und Dichten in den SCvH-Profilen sind eine Konsequenz der kleineren Radien für gleiches Z . Wie in Abbildung 4.5 gezeigt, findet man mit der SCvH-EOS kompaktere Objekte.

Bemerkenswert an dieser Stelle ist, dass Dichten um die 400 g/cm³ (gestrichelte Linie im linken Bild von Abbildung 4.7) vor Kurzem an der National Ignition

Facility (NIF) in Livermore in Schockwellenexperimenten erreicht wurden¹⁵⁰, auch wenn die experimentellen Temperaturen mit etwa 50 Millionen Kelvin deutlich größer waren.

4.4. Zusammenfassung von Kapitel 4

In diesem Kapitel wurden Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen (MRR) für Große Planeten und Braune Zwerge auf Basis der LM-REOS.3 vorgestellt [A2].

Für Jupiter konnten die Drei-Schichten-Modelle, welche mit der LM-REOS.2 schon alle Beobachtungsdaten bezüglich des Gravitationsfeldes reproduzierten [A10], durch die neue He-REOS.3 dahingehend verbessert werden, dass nun ein atmosphärischer Metallgehalt von $3 \times Z_{\text{solar}}$ erreicht wird. Dieser Wert liegt sogar innerhalb der Messwerte für Kohlenstoff, einem der häufigsten schweren Elemente in Jupiter [A2].

Für das Innere von Braunen Zwergen und massereichen Großen Planeten wurde das Ein-Schicht Modell zugrunde gelegt und die atmosphärische Randbedingung aus Atmosphärenprofilen für die einzelnen Objekte bestimmt. Entsprechende MRRs basierend auf der SCvH-Zustandsgleichung sagen etwas kompaktere Objekte voraus als mit der LM-REOS.3, wobei die Abweichung bei Objekten mit $M_{\text{Obj}} \sim 1M_{\text{J}}$ am größten und im Bereich Brauner Zwerge nahezu konstant ist [A2].

Bei gegebener Masse und Radius, siehe Tabelle 4.1, konnte für den Braunen Zwerg Gliese-229b ein Metallgehalt von $Z = 0,0147 Z_{\text{solar}} = 0,0156 Z_{\text{Stern}}$ berechnet werden. Für den MGP KOI-889b ergibt sich $Z = 0,037 Z_{\text{solar}} = 0,029 Z_{\text{Stern}}$. Die zentralen Werte für den Druck, die Temperatur und die Dichte im Zentrum der untersuchten Objekte in Abhängigkeit von der verwendeten Zustandsgleichung ist in Tabelle 4.2 zu sehen. Die systematische Überschätzung der Werte durch die SCvH-EOS liegt an den systematisch kleineren Radien, die von dieser EOS für gleiches Z vorhergesagt werden. Sämtliche Ergebnisse dieses Kapitels, insbesondere die Strukturmodelle für die Braunen Zwerge, welche erstmalig in der Literatur auf *ab initio*-Zustandsgleichungen basieren, wurden in den Astrophysical Journal Supplement Series [A2] veröffentlicht.

Tabelle 4.2.: Vorhersagen der Strukturmodelle für die zentralen Werte von Druck P_c , Temperatur T_c und Dichte ρ_c der untersuchten MGPs und Braunen Zwerge [A2]. Die Werte in Klammern sind aus dem SCvH-Strukturmodell.

Objekt	Druck P_c [Gbar]	Temperatur T_c [K]	Dichte ρ_c [g/cm ³]
Gliese-229b	222 (248)	1,18 Mio (1,12 Mio)	448 (490)
Corot-3b	27,9 (30,9)	422000 (401000)	137 (148)
KOI-889b	4,2 (4,7)	169000 (150000)	47 (52,4)

5. Materialeigenschaften im Innern von GPs und BDs

Im vorherigen Kapitel wurden mit Hilfe der LM-REOS.3-Zustandsgleichung Strukturmodelle von massereichen Großen Planeten und Braunen Zwergen verschiedener Masse berechnet. Mit der Kenntnis der thermodynamischen Zustände im Innern dieser Objekte sollen nun in diesem Kapitel die Materialeigenschaften der Wasserstoff-Helium-Mischung unter diesen Bedingungen berechnet werden. Der Fokus liegt hier auf den thermodynamischen Materialeigenschaften wie den spezifischen Wärmekapazitäten c_P und c_V , der Schallgeschwindigkeit c_s , dem isobaren Ausdehnungskoeffizienten α und der isothermen Kompressibilität κ_T . Diese Größen können über Ableitungen der Zustandsgleichungen $P(\rho, T)$ und $u(\rho, T)$ berechnet werden. Wichtig ist an dieser Stelle, dass die lineare Mischung LM-REOS.3 für die Materialeigenschaften zugrunde liegt.

Im Gegensatz dazu werden für die Transporteigenschaften eigene VASP-Simulationen der realen Wasserstoff-Helium-Mischung durchgeführt. Aus diesen werden dann die elektrische σ und thermische λ Leitfähigkeit berechnet sowie die Scherviskosität η und das Rosseland-Mittel der Opazität κ_R . Diese Größen sind relevant wenn man Dynamomodelle für diese Braune Zwerge und den MGP über magneto-hydrodynamische Simulationen berechnen möchte. Diese Rechnungen werden beispielsweise von Kollegen am Max-Planck-Institut für Sonnensystemforschung um Christensen und Wicht durchgeführt^{103,[A5]}. Im Innern von Braunen Zwergen zirkuliert die Materie in Konvektionszellen durch das gesamte Objekt. Wie sich herausstellen wird, ist diese Materie fast überall ionisiert, sodass Braune Zwerge eine Dynamoregion besitzen, die sich fast über das ganze Objekt erstreckt. Hinweise auf diese magnetische Aktivitäten in vollkonvektiven M-Zwergen und Braunen Zwergen gibt es bereits in Simulationen^{36;37;54} und in Beobachtungen^{267–269}.

5.1. Berechnung von thermodynamischen Materialeigenschaften

Unter thermodynamischen Materialeigenschaften versteht man Größen, die aus Differentiation der thermischen $P(\varrho, T)$ oder der spezifischen kalorischen Zustandsgleichung $u(\varrho, T)$ hervorgehen. Dazu gehören der isobare Expansionskoeffizient α , die isotherme Kompressibilität κ_T , die Wärmekapazitäten bei konstantem Volumen/Dichte c_V und bei konstantem Druck c_P , sowie die Schallgeschwindigkeit c_s . Berechnet werden sie wie folgt:

$$\alpha = -\frac{1}{\varrho} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\varrho \left(\frac{\partial \varrho}{\partial P} \right)_T, \quad (5.1)$$

$$\kappa_T = \frac{1}{\varrho} \left(\frac{\partial \varrho}{\partial P} \right)_T, \quad (5.2)$$

$$c_V = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_\varrho, \quad (5.3)$$

$$c_P = c_V + \frac{T\alpha^2}{\varrho\kappa_T}, \quad (5.4)$$

$$c_s = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \varrho} \right)_s} = \sqrt{\frac{c_P}{\varrho c_V \kappa_T}}. \quad (5.5)$$

Diese Größen werden im Folgenden für Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b aus der linearen Mischungszustandsgleichung LM-REOS.3 berechnet¹⁷, siehe Kapitel 2.5. Sämtliche gezeigten Vergleiche zu Jupiter stammen aus der Veröffentlichung von French *et al.*^{99,[A9]} und basieren auf der LM-REOS.2.

Das Gitter dieser EOS-Daten wird über kubische Splineinterpolation verdichtet und die Materialeigenschaften ergeben sich dann aus der analytischen Ableitung der Splinepolynome. Der Fehler der Ergebnisse ist demnach eng mit der Güte der Zustandsgleichungen und der Interpolation verknüpft. In Anlehnung an die Abweichung der Zustandsgleichungen von der thermodynamischen Konsistenz im Bereich der GP- und BD-Adiabaten von $\leq 5\%$ wird der Fehler für die Materialeigenschaften ebenfalls mit $\sim 5\%$ abgeschätzt. Die Daten sind neben den folgenden Abbildungen auch in den Tabellen B.1 (Gliese-229b), B.5 (Corot-3b) und B.3 (KOI-889b) zu finden. Die Ergebnisse für Jupiter⁹⁹ sind in Abbildung 5.1 zu sehen. Die Wärmekapazitäten steigen erst von der Oberfläche des Planeten bis zu

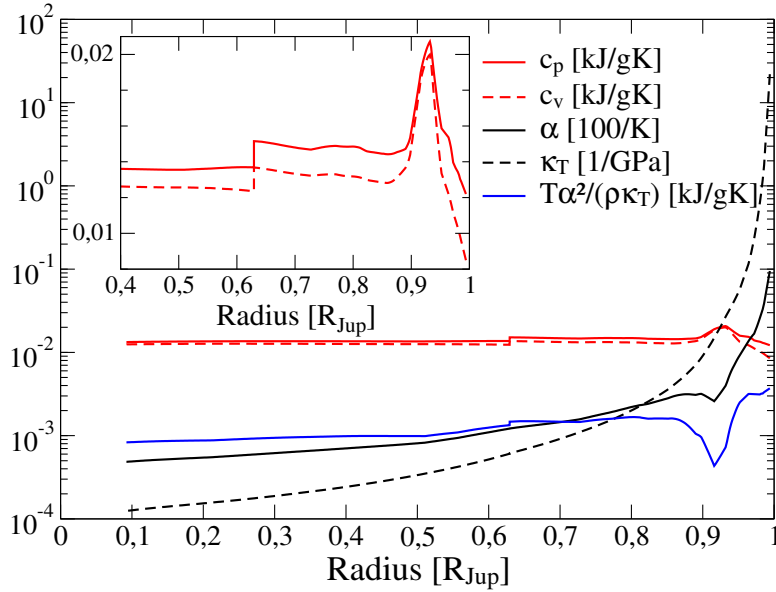


Abbildung 5.1.: Thermodynamische Materialeigenschaften entlang der Jupiteradiabaten. Die blaue Kurve entspricht $c_P - c_V$ und der Sprung bei $0,63 R_J$ tritt an der Schichtengrenze auf wegen der verschiedenen Zusammensetzung der Schichten [A9].

$\sim 0,9 R_J$ ($0,5 \text{ Mbar}$) an. Dort besitzen sie ein Maximum aufgrund der Dissoziation der Wasserstoffmoleküle und der damit einhergehenden latenten Wärme. Weiter im Innern von Jupiter ($R \leq 0,85 R_J$) sind c_P und c_V bis zur Kern-Mantel-Grenze (core-mantle boundary: CMB) nahezu konstant, wie es für entartete Materie vorhergesagt wird¹⁴³. Eine Ausnahme bildet noch der Sprung zwischen den Schichtengrenzen bei $0,69 R_J$ aufgrund deren unterschiedlicher Zusammensetzung. Der Sprung geht nach unten, da die Wasserstoffkonzentration (mit den höheren Wärmekapazitäten) in der inneren Schicht abnimmt. Der Unterschied zwischen den beiden Wärmekapazitäten wird vom isobaren Expansionskoeffizienten α , κ_T , der Temperatur T und der Dichte ρ bestimmt, siehe Gleichung 5.4. Die Temperatur und die Dichte steigen monoton vom Jupiterrand bis zum Kern an, siehe Abbildung 4.3, und κ_T fällt monoton. Nur α hat ein lokales Minimum genau im Dissoziationsbereich der Wasserstoffmoleküle. Der quadratische Einfluss von α in Gleichung 5.4 führt dazu, dass der Abstand von c_P und c_V in diesem Gebiet sehr klein ist. Weiter im Innern kompensieren sich die Größen in Gleichung 5.4 durch

ihr glattes Verhalten, was zu dem parallelen Verlauf der Wärmekapazitäten führt. Die Tatsache, dass bei $0,9 R_J$ die Wasserstoffmoleküle dissoziieren, ist noch einmal sehr gut im Phasendiagramm von Wasserstoff in Abbildung 2.3 zu sehen. Die Kurve von Tamblin³⁰⁷ zeigt Druck-Temperatur-Punkte an denen Wasserstoff zu 50 % dissoziiert ist. Die Extrapolation dieser Kurve schneidet die Jupiteradiabate genau bei deren Abflachung, welche ebenfalls dissoziationsgetrieben ist. Im Nenner der Isentropengleichung 4.4, welche den Temperatur-Dichte-Verlauf in Jupiter beschreibt, steht die isochore Wärmekapazität, die durch ihr Maximum (latenten Wärme zum Aufbrechen der Molekülbindungen) an dieser Stelle das Abflachen bestimmt. Anders verhält es sich bei den Wärmekapazitäten der heißeren Objekte,

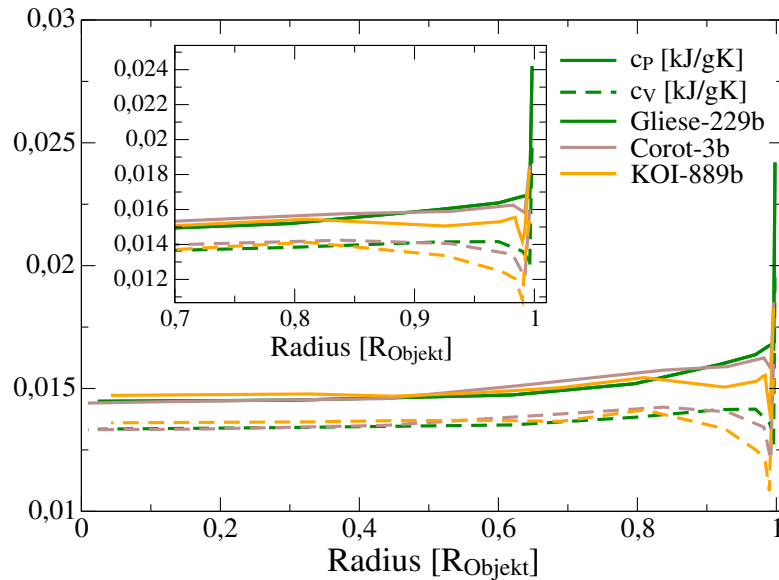


Abbildung 5.2.: Spezifische Wärmekapazitäten in Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b (orange) [A1].

KOI-889b, Corot-3b und Gliese-229b, siehe Abbildung 5.2. Hier sind die Wasserstoffmoleküle schon fast vollständig dissoziiert, sodass man kein lokales Maximum wie bei Jupiter sieht. Ganz außen in den Objekten befindet man sich eher auf der absteigenden Flanke eines solchen Maximums, welche etwas tiefer geht, als bei Jupiter. Anschließend sind c_P und c_V im Rahmen der Fehlerbalken wieder nahezu konstant, wie es auch schon bei Jupiter der Fall ist.

Die isotherme Kompressibilität κ_T und der isobare Expansionskoeffizient α sind

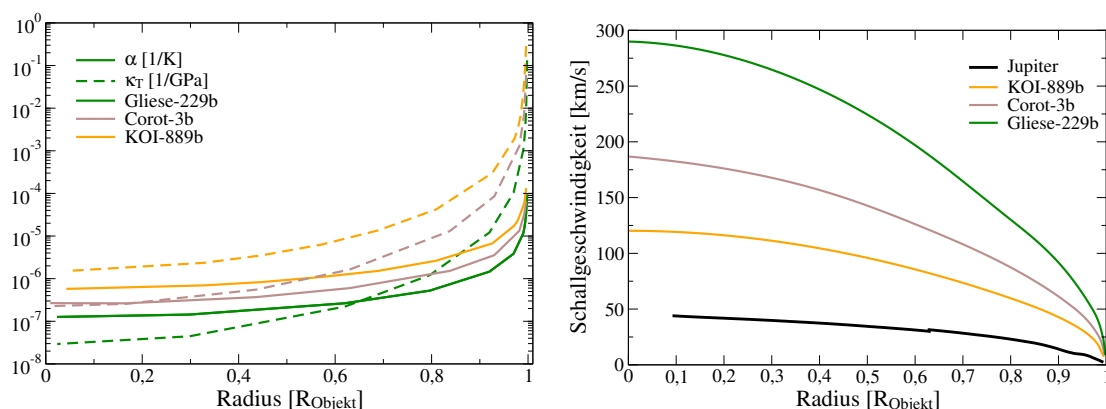


Abbildung 5.3.: Links: Isobarer Expansionskoeffizient α und isotherme Kompressibilität κ_T im Innern von Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b (orange) [A1]. Rechts: Schallgeschwindigkeiten im Innern von Jupiter (schwarz), Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b (orange) [A1,A9].

für den massereichen Großen Planeten KOI-889b und die Braunen Zwerge Gliese-229b und Corot-3b im Innern monoton fallend, siehe linkes Bild von Abbildung 5.3. Im entsprechenden rechten Bild sind die Schallgeschwindigkeiten zu sehen. Die Jupiterkurve (schwarz) hat die niedrigsten Werte, da im Innern im Vergleich die geringsten Druck-Dichte-Änderungen vorkommen. Deutlich ist wieder das Abflachen im Dissoziationsgebiet und der Sprung an der Schichtengrenze, einhergehend mit dem dortigen Dichtesprung und der Abnahme der Wasserstoffkonzentration im inneren Mantel. Da Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b (orange) als homogene, einschichtige Objekte behandelt werden, sieht man bei diesen Kurven keinen Dichtesprung. Auch der Unterschied im Metallgehalt (Gliese-229b und Corot-3b haben $Z = 2\%$ und KOI-889b $Z = 4\%$) führt zu keinen offensichtlichen Unterschieden im Verhalten der Materialeigenschaften.

5.2. Berechnung von Transporteigenschaften

Die Berechnung von Transporteigenschaften im Innern von Großen Planeten und Braunen Zwergen basiert auf der Linear-Response-Theory¹⁸⁰ (LRT) und ist wesentlich aufwändiger als die Berechnung der thermodynamischen Materialeigenschaften. Für jeden ausgewählten Dichte-Temperatur-Punkt entlang einer Isentro-

pe müssen eigene DFT-MD-Simulationen eines Wasserstoff-Helium-Gemisches mit den entsprechenden Konzentrationen (reale Mischungen) durchgeführt werden. Da die Teilchenhäufigkeit schwerer Elemente in Großen Planeten und Braunen Zwergen gering ist, werden diese bei der Berechnung von Transporteigenschaften in der realen Mischung vernachlässigt. Jedoch wird gewährleistet, dass der Druck in der realen H-He-Mischung den gleichen Wert hat wie in der linearen Mischung im Strukturmodell.

Die DFT-MD-Rechnungen wurden für die folgenden Ergebnisse ebenfalls mit VASP durchgeführt. Aufgrund der Born-Oppenheimer-Näherung, welche auch in VASP implementiert ist, siehe Kapitel 2, müssen die Beiträge der Elektronen und der Ionen zu der jeweiligen Transportgröße separat betrachtet werden. Im Falle der elektrischen Leitfähigkeit wird sich im folgenden auf den elektronischen Beitrag beschränkt, da in ionisierten Systemen die leichten Elektronen sich viel schneller bewegen, als die schwereren Ionen und damit den wesentlichen Beitrag liefern. In nicht-leitenden H-He-Systemen mit an den Ionen lokalisierten Elektronen kommt es auch nicht zum Ladungstransfer zwischen den Teilchensorten, sodass das sog. „proton hopping“¹⁰⁰ als ionischer Leitfähigkeitsbeitrag ausgeschlossen werden kann⁹⁹. Somit gilt in sehr guter Näherung für die elektrische Leitfähigkeit $\sigma = \sigma_e + \sigma_i = \sigma_e$. Wie in Abschnitt 5.2.3 zu sehen sein wird, berechnet sich das Rosseland-Mittel der Opazität κ_R letztendlich aus der elektrischen Leitfähigkeit. Wichtige Beiträge aus molekularer Absorption durch Schwingungs- und Rotationsanregungen in Bereichen, in denen noch Moleküle vorkommen, sowie Streuung an schwereren Ionen als H und He werden durch die Näherung für σ nicht berücksichtigt, sodass wieder reine elektronische Beiträge in κ_R einfließen. Dies ist eine vernünftige Näherung im Bereich der ionisierten und entarteten Materie, wie sie im Großteil des Innern kompakter Objekte vorkommt.

Die thermische Leitfähigkeit $\lambda = \lambda_e + \lambda_i$ wird im nicht-leitenden Bereich durch Stöße zwischen den Molekülen/Atomen dominiert, sodass der ionische Beitrag λ_i zum Beispiel für Jupiter nicht vernachlässigt werden kann⁹⁹. Im ionisierten System kommt der wesentliche Beitrag zur thermischen Leitfähigkeit wieder von den Elektronen. Für Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b, die in ihrem Innern nahezu überall ionisierte Materie enthalten, ist daher $\lambda = \lambda_e$ eine vernünftige Näherung und wird im Folgenden auch verwendet.

Anders verhält es sich mit der Scherviskosität η . Diese wird durch die Bewegung der Atome/Ionen dominiert, sodass der Beitrag der freien Elektronen vernachlässigt werden kann^{21;22}.

Im Folgenden werden die Scherviskositäten, elektrische und thermische Leitfähigkeiten, sowie das Rosseland-Mittel der Opazität für Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b vorgestellt. Vergleichskurven für Jupiter stammen aus der Publikation von French *et al.*^{99[A9]}. Die Ergebnisse sind neben den Abbildungen auch in den Tabellen B.2 (Gliese-229b), B.6 (Corot-3b) und B.4 (KOI-889b) zu sehen.

Sofern nicht anders angegeben wurden sämtliche Transporteigenschaften durch DFT-MD-Simulationen eines H-He-Systems mit einer solaren Heliumkonzentration von $Y = 0,275$ mit VASP¹⁷⁶⁻¹⁷⁸ unter der Verwendung des PBE-XC-Funktional²⁵³ berechnet, siehe auch Kapitel 2. Die Drücke dieser realen Mischung stimmen mit den Drücken auf den jeweiligen Isentropen (lineare Mischung) fast überall innerhalb von 2 % überein, während Dichte und Temperatur identisch sind. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen und den Ionen im System wurde für Dichten $\rho \leq 9 \text{ g/cm}^3$ mit den PAW-Potentialen^{25;179} realisiert, wobei für Wasserstoff bei $\rho \geq 2 \text{ g/cm}^3$ das härtere Potential mit dem entsprechenden Energie-Cutoff verwendet wurde, siehe Kapitel 2.2. Bei Dichten $\rho > 9 \text{ g/cm}^3$ versagen diese PAW-Potentiale und das reine Coulomb-Potential mit einem Cutoff von 10 keV wurde verwendet.

5.2.1. Scherviskosität

Die Scherviskosität in einem Fluid kann in der LRT^{5;7;180} über ein Zeitintegral über die Summe der Autokorrelationsfunktionen (AKF) der Nichtdiagonalelemente des Spannungstensors berechnet werden:

$$\eta = \frac{V}{3k_B T} \int_0^\infty dt \sum_{ij=\{xy,yz,zx\}} \langle p_{ij}(0)p_{ij}(t) \rangle, \quad (5.6)$$

mit der Boltzmannkonstanten k_B , dem Volumen der Simulationsbox V und der Temperatur T des Systems. Zusätzlich findet man durch Rotationsinvarianz des Spannungstensors noch zwei zusätzliche AKFs⁵: $1/2(\langle p_{xx}(0)p_{xx}(t) \rangle - \langle p_{yy}(0)p_{yy}(t) \rangle)$ und $1/2(\langle p_{yy}(0)p_{yy}(t) \rangle - \langle p_{zz}(0)p_{zz}(t) \rangle)$, sodass man für eine gute Statistik fünf unabhängige Autokorrelationsfunktionen berechnen kann.

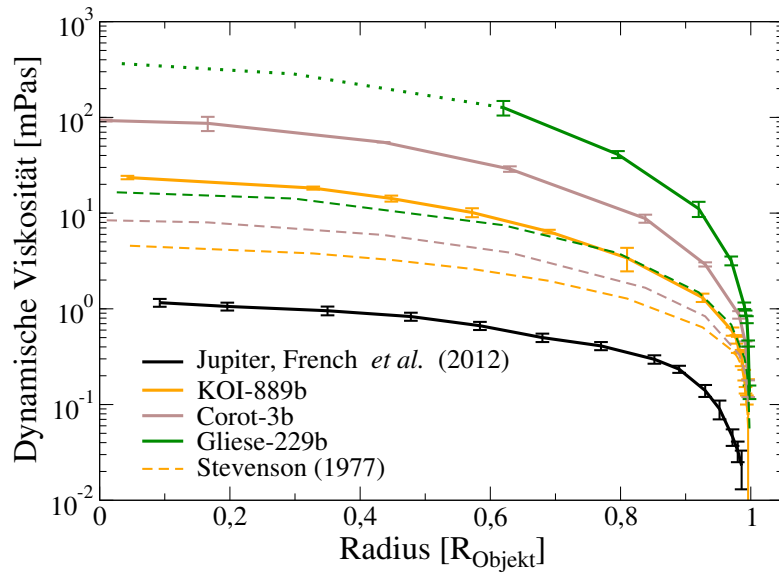


Abbildung 5.4.: Dynamische Scherviskosität η für Jupiter⁹⁹ (schwarz), KOI-889b (orange), Corot-3b (braun) und Gliese-229b (grün). Zum Vergleich sind die entsprechenden Ergebnisse von Stevenson³⁰² (gestrichelt) gezeigt [A1,A9].

Um die Scherviskosität mit einem Fehler von i.d.R. $\leq 10\%$ zu berechnen wurden Simulationen mit 116 Wasserstoff- und 11 Heliumatomen durchgeführt. Die Brillouin-Zone wurde mit einem $2 \times 2 \times 2$ Monkhorst-Pack \vec{k} -Punkt-Satz²²⁵ ausgewertet, da die AKF bei Verwendung des Baldereschi-Punktes¹² für viele Dichte-Temperatur-Konfigurationen nicht um 0 fluktuierte. Für eine gute Statistik der AKFs wurden mindestens 120000 Zeitschritte simuliert mit Gesamtsimulationszeiten zwischen 20 und 80 ps. Dies sind mit die aufwändigsten Rechnungen in der vorliegenden Arbeit. Für sämtliche Scherviskositätsdaten zusammen wurde insgesamt über eine Nanosekunde auf den zugänglichen Hochleistungsrechnern über eine dauer von drei Monaten simuliert. Das Ergebnis für die dynamische Scherviskosität (η) ist in Abbildung 5.4 zu sehen. Für alle Objekte wächst η monoton von der Oberfläche zum Zentrum an. Je kompakter der Planet/Braune Zwerg ist, desto höher ist seine Dichte im Inneren und desto höher ist die Scherviskosität. In Abbildung 5.5 ist die kinematische Viskosität $\nu = \eta/\rho$ gezeigt. Diese Größe mit der Dimension [Länge²/Zeit] wird in den Dynamosimulationen für das Magnetfeld³²² genutzt und i.d.R. als konstant angenommen. Am Kurvenverlauf kann man sehen, dass diese Annahme gerechtfertigt ist. Abgesehen von den äußersten

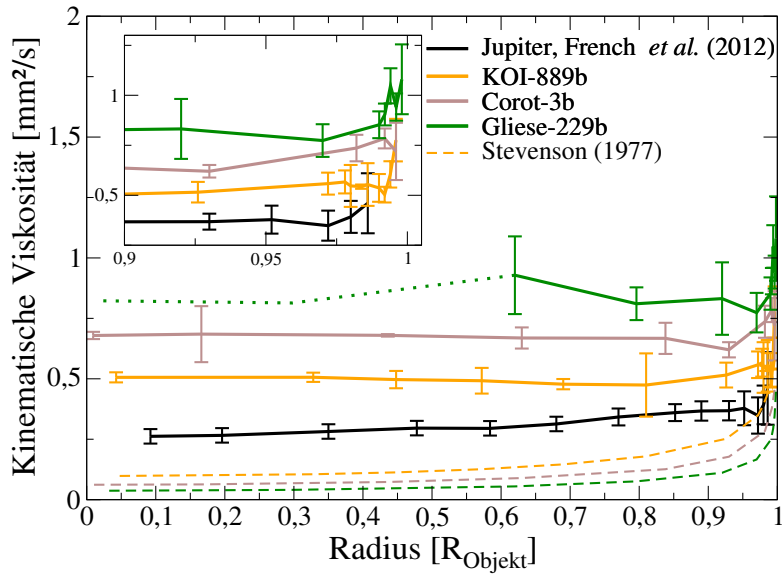


Abbildung 5.5.: Kinematische Scherviskosität ν für Jupiter⁹⁹ (schwarz), KOI-889b (orange), Corot-3b (braun) und Gliese-229b (grün). Zum Vergleich sind die entsprechenden Ergebnisse von Stevenson³⁰² (gestrichelt) gezeigt [A1,A9].

3 % der Objekte sind die kinematischen Viskositäten innerhalb der Fehlerbalken konstanten, wie es für entartete Materie vorhergesagt wurde¹⁴³. Bei Jupiter ist die Materie noch nicht so stark entartet, sodass man noch ein leichtes Gefälle in ν sieht. In beiden Abbildungen erstreckt sich die gepunktete grüne Linie über die Hälfte des Innern von Gliese-229b. Für diesen Bereich $200 \text{ g/cm}^3 \leq \rho \leq 450 \text{ g/cm}^3$ konnten aus den VASP-Simulationen keine vernünftigen Spannungstensenoren mehr ausgelesen werden (Überschreitung der in VASP implementierten Fließkomma-genauigkeit). Aus der sinnvollen Annahme, dass ν in diesem um so stärker entarteten Bereich konstant bleibt, konnte dann auch eine sinnvolle Extrapolation der η -Werte vorgenommen werden. Die Vergleichsergebnisse von Stevenson³⁰² unter der Annahme eines Harte-Kugel-Systems unterschätzen die DFT-MD-Werte deutlich.

5.2.2. Elektrische und thermische Leitfähigkeit

Der elektronische Beitrag zur thermischen λ_e und elektrischen σ_e Leitfähigkeit kann ebenfalls im Rahmen der LRT über die frequenzabhängigen Onsager-Koeffi-

zienten $L_{mn}(\omega)$ ¹³⁸ berechnet werden:

$$L_{mn}(\omega) = \frac{2\pi q^{4-m-n}}{3\Omega m_e^2 \omega} \sum_{\mathbf{k}\nu\mu} |\langle \mathbf{k}\nu | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k}\mu \rangle|^2 (f_{\mathbf{k}\nu} - f_{\mathbf{k}\mu}) \\ \times \left(\frac{E_{\mathbf{k}\mu} + E_{\mathbf{k}\nu}}{2} - h_e \right)^{m+n-2} \delta(E_{\mathbf{k}\mu} - E_{\mathbf{k}\nu} - \hbar\omega) \quad , \quad (5.7)$$

$$\sigma_e = \lim_{\omega \rightarrow 0} L_{11}(\omega) \quad , \quad (5.8)$$

$$\lambda_e = \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{1}{T} \left(L_{22}(\omega) - \frac{L_{12}^2(\omega)}{L_{11}(\omega)} \right) \quad . \quad (5.9)$$

Neben der Frequenz ω enthalten diese Gleichungen die Masse m_e und Ladung $q = -e$ des Elektrons, die Enthalpie pro Elektron h_e , die Eigenwerte $E_{\mathbf{k}\mu}$ und die Fermi-Besetzungszahl $f_{\mathbf{k}\mu}$ des Bloch-Zustands $|\mathbf{k}\mu\rangle$, sowie die Matrixelemente $\langle \mathbf{k}\nu | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{k}\mu \rangle$ mit dem Impulsoperator. Es kommt demnach nur zu einem Beitrag zu $L_{mn}(\omega)$, wenn ein eingestrahktes Photon der Energie $\hbar\omega$ genau die Differenz zweier Eigenzustandsenergien trifft (δ -Funktion). Der Onsager-Koeffizient $L_{11}(\omega) = \sigma(\omega)$ ist auch bekannt als die frequenzabhängige Kubo-Greenwood-Formel^{112;180}. Den statischen Limes für die elektrische und thermische Leitfähigkeit erhält man nach den Gleichungen 5.8 und 5.9 aus der Grenzwertbildung $\omega \rightarrow 0$.

Eine aktuelle Diskussion bezüglich der Berechnung von Leitfähigkeiten mittels DFT-MD-Simulationen betrifft den Einfluss von Elektron-Elektron-Streuung, welche im Kohn-Sham-Hamiltonian (Gleichung 2.3) über das Austausch-Korrelationsfunktional mit berücksichtigt wird. Die offene Frage ist, ob der Einfluss insbesondere im Grenzfall des vollständig ionisierten Plasmas bei niedriger Dichte und ohne Entartung, welcher durch die Spitzer-Theorie beschrieben²⁰⁴ ist, richtig wiedergegeben wird. Frühere Arbeiten^{270;275;276} auf Basis der LRT, in denen die Zwei-Teilchen-Streuung der Elektronen über die T-Matrix berechnet wird, reproduzieren diesen Grenzfall wie auch den des vollständig ionisierten, entarteten Plasmas bei hohen Dichten. Dieser Fall wird durch die Ziman-Faber-Theorie³³⁷ beschrieben. Für vollständig ionisierte Materie beliebiger Entartung können Interpolationsformeln für die elektrische Leitfähigkeit im Sinne einer Virialentwicklung angegeben werden^{275;276}. In Bezug auf den Spitzer-Grenzfall und die Elektron-Elektron-Streuung in den DFT-MD-Rechnungen zeichnen sich derzeit zwei Ansätze ab. Während Reinholz *et al.*²⁷¹ und Zhang *et al.*³³¹ einen Zusatzterm zu σ vorschlagen, welcher vor allem im klassischen Grenzfall relevant ist und mit zunehmender

Entartung an Einfluss verliert, finden Whitley *et al.*³²¹ eine gute Übereinstimmung von σ aus DFT-MD-Simulationen mit quantenkinetischen Rechnungen, während λ überschätzt wird. Dies liegt am quadratischen Einfluss der Onsager-Koeffizienten in λ , sodass hier nach Whitley Verbesserungen in der Theory und der Implementierung notwendig sind. Die thermodynamischen Zustände in Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b sind jedoch nahezu überall entartet, sodass die vermeintlichen Effekte von Elektron-Elektron-Streuung auf σ und λ bei diesen Objekten in guter Näherung vernachlässigbar sind.

Die Ergebnisse für die Leitfähigkeiten werden je Dichte-Temperatur-Punkt aus 20 unabhängigen Rechnungen (Schnappschüsse) gemittelt. Die dafür benötigten statischen Ionenkonfigurationen werden aus equilibrierten DFT-MD-Simulationen mit 22 Helium- und 232 Wasserstoffatomen gewonnen. Für konvergierte Leitfähigkeitswerte wurden die Potentiale für die Elektron-Ion-Coulombwechselwirkungen wie eingangs beschrieben dichteabhängig gewählt und ein $4 \times 4 \times 4$ - \vec{k} -Punkt-Satz genutzt. Da für KOI-889b, Gliese-229b und Corot-3b bei allen gewählten $\rho - T$ -Punkten nahezu keine Wasserstoffmoleküle mehr vorhanden sind, wurde das PBE-XC-Funktional für ausreichend angesehen, um vernünftige Werte für die Leitfähigkeiten zu erhalten. Anders ist der Fall bei Jupiter, wo der Übergang vom molekularen, nichtleitenden zum atomaren, leitenden Fluid eine wichtige Rolle spielt. Um das schon erwähnte Bandlückenproblem des PBE-Funktional zu beheben wurden die Jupiter-Leitfähigkeiten von French *et al.*^{99[A9]} mit dem Hybrid-Funktional von Heyd, Scuseria und Ernzerhof^{131;132} (HSE) berechnet.

Die Ergebnisse für die elektrische und thermische Leitfähigkeit sind in Abbildung 5.6 zu sehen. Im linken Bild oben ist die elektrische Leitfähigkeit σ abgebildet, darunter die magnetischen Diffusivitäten $\beta = 1/\mu_0\sigma$, welche wieder die Dimension [Länge²/Zeit] hat und in magneto-hydrodynamischen Simulationen verwendet wird. Wie eingangs beschrieben ist $\sigma = \sigma_e$. Bei den DFT-MD-Kurven für Jupiter^{99[A9]} sieht man sehr schön den Anstieg von σ in den äußersten 10 % um 12 Größenordnungen bei den HSE-Ergebnissen (schwarz) und um 10 Größenordnungen bei den PBE-Ergebnissen. Die HSE-Kurve ist in sehr guter Übereinstimmung mit einem Halbleitermodell von Liu und Stevenson¹⁹⁰, welches an experimentelle Daten für Wasserstoff^{236;239;320} angepasst wurde. Wie schon erwähnt liegt dies an der besseren Beschreibung der Bandlücke durch das HSE-XC-Funktional.

5. Materialeigenschaften im Innern von GPs und BDs

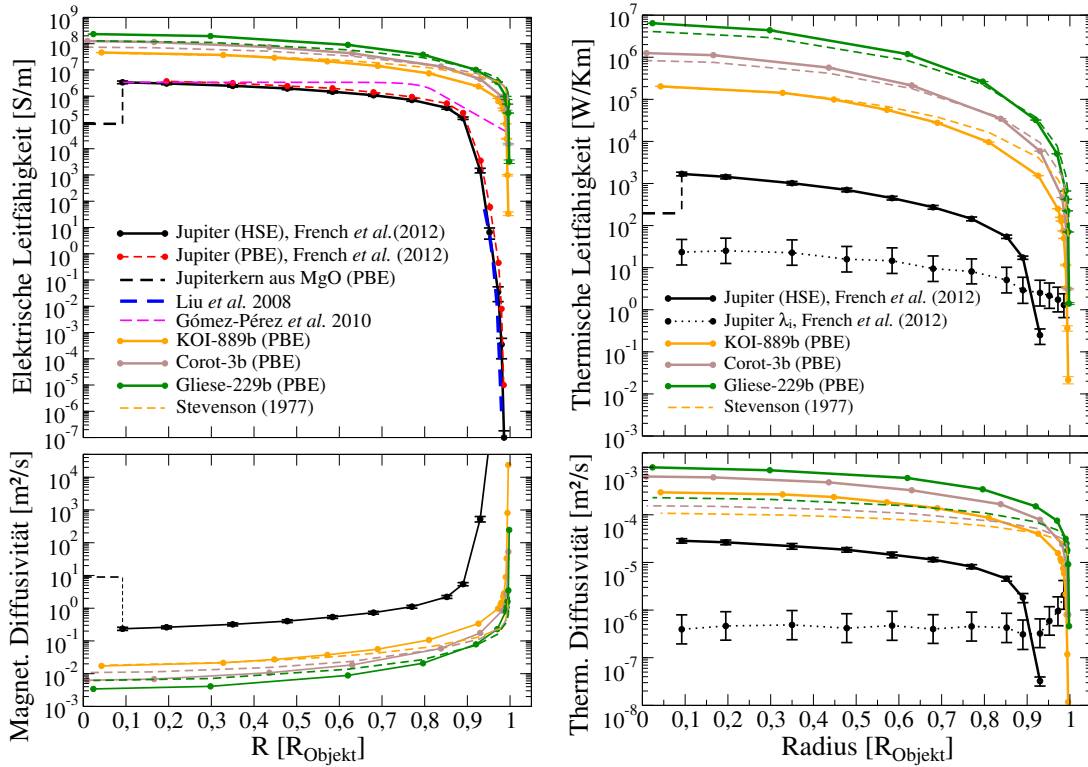


Abbildung 5.6.: Elektrische σ (linkes Bild) und thermische Leitfähigkeit λ (rechtes Bild) mit gleichem Farbcode wie in den Abbildungen 5.4 und 5.5 [A1,A9]. λ_i ist der ionische Beitrag zur therm. Leitfähigkeit. Für Jupiter sind durchgezogene Linien mit dem HSE- und gestrichelte mit dem PBE-XC-Funktional gerechnet. Als Vergleich für σ in Jupiter ist das Halbleitermodell von Liu¹⁹⁰ (blau) und ein in Magnetfeldrechnungen genutzter Verlauf von σ^{106} (magenta) gezeigt. Ebenfalls abgebildet sind die magnetischen $\beta = 1/\mu_0\sigma$ und thermischen Diffusivitäten (Temperaturleitfähigkeit) $\kappa = \lambda/\rho c_P$, sowie die jeweiligen Vergleichskurven von Stevenson³⁰² (gestrichelt).

Des Weiteren ist für σ ein Verlauf nach Gómez-Pérez *et al.*¹⁰⁶ gezeigt, wie er in Magnetfeldsimulationen genutzt wird. Das leitende Innere wird mit einem polynomialen Fit abgebildet, während die Kurve zum Jupiterrand hin exponentiell abfällt. Letzteres reproduziert nicht den super-exponentiellen Abfall von σ , wie es die DFT-MD-Rechnungen vorhersagen. Während Gastine *et al.*¹⁰³ in ihren Magnetfeldsimulationen ebenfalls einen exponentiellen Randverlauf für σ annehmen, adaptiert Jones¹⁵⁶ den super-exponentiellen Verlauf. Die resultierenden Magnet-

felder für Jupiter beider Publikationen stimmen erstmals mit dem beobachteten Magnetfeld überein [A5].

Bezüglich des σ -Verlaufs in Jupiter ist in Abbildung 5.6 erstmalig auch eine Vorhersage für den Gesteinskern zu sehen [A1]. In den magneto-hydrodynamischen Simulationen für Jupiters Magnetfeld wird als eine Randbedingung ein leitender Kern definiert. Unter der Annahme der Kern bestehe aus MgO⁴⁸ mit den Referenzwerten $T = 20000$ K und $\varrho = 15$ g/cm³ erhält man aus DFT-MD-Rechnungen mit dem PBE-Funktional $\sigma \sim 90000$ S/m, was einem sogenannten „bad metal“ entspricht und es sich demnach nicht um einen Isolator handelt.

Die Ergebnisse für die elektrische Leitfähigkeit innerhalb von Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b (orange) auf Basis des PBE-Funktional übersteigen die Jupiterresultate um bis zu 1,5 Größenordnungen. Einerseits sind die Dichten und damit auch die Elektronendichten n_e in den Objekten deutlich größer als in Jupiter. In entarteter Materie ist die Leitfähigkeit proportional zur Fermienergie E_F für die wiederum gilt $E_F \sim n_e^{2/3}$. Zusätzlich ist unter den extremeren Bedingungen in diesen Objekten Helium vollständig ionisiert, im Gegensatz zu Jupiter, wo Helium noch atomar ist³⁰³.

Insbesondere die orange Kurve für KOI-889b stimmt ab $0,7 R_{\text{Objekt}}$ mit den Vergleichswerten von Stevenson³⁰² (gestrichelte Kurven) sehr gut überein, welche auf der Ziman-Theorie für entartete Materie und den Strukturfaktor eines Harte-Kugel-Systems beruhen.

Auch der super-exponentielle Anstieg von σ unterhalb der Oberfläche ist bei KOI-889b mit vier Größenordnungen am ausgeprägtesten. Offensichtlich ist das H-He-System am äußersten Rand dieses massereichen Großen Planeten wie auch bei den Braunen Zwergen kein Isolator mehr wie bei Jupiter, aber noch kein Metall. Der Übergang zum Metall vollzieht sich aber wesentlich schneller als bei Jupiter aufgrund der deutlich schneller steigenden Dichten und Temperaturen im Innern, siehe Kapitel 4.

Die Kurven für die thermische Leitfähigkeit λ (rechtes, oberes Bild von Abbildung 5.6) haben einen ähnlichen relativen Verlauf wie die von σ . Bei gegebenem Radius ist λ der drei massereicherer Objekte deutlich größer als bei Jupiter, wobei für KOI-889b am äußersten Rand der Wert unterhalb des ersten Datenpunktes von

Jupiter liegt. Der Anstieg vom Rand zum Inneren ist ebenfalls ausgeprägter als bei Jupiter. Aufgrund der höheren Entartung liegen die Werte von λ im metallischen Bereich ebenfalls signifikant über den Jupiterergebnissen. Bemerkenswert ist, wie gut die Resultate von Stevenson (gestrichelte Kurven) vor allem den Verlauf der grünen Kurve für Gliese-229b wiedergeben und den zentralen Wert von KOI-889b treffen. Das entspricht den Erwartungen, da die Ziman-Theorie, auf der die Ergebnisse von Stevenson unter anderem basieren, für flüssige Metalle und damit auch für entartete Systeme entwickelt wurde.

Die gepunktete Linie in dem Bild ist der Beitrag der Ionen zu $\lambda = \lambda_e + \lambda_i$ unter Jupiterbedingungen. Diese wurden aus den Informationen der DFT-MD-Läufe über das Ionensystem, wie Ionengeschwindigkeiten und der Paarverteilungsfunktion, welche dann auf ein effektives Wechselwirkungspotential führt, und in die Berechnung des Wärmestroms eingehen, ermittelt^{99[A9]}. Offensichtlich dominieren die ionischen Beiträge den nichtmetallischen Bereich. Entsprechende Rechnungen wurden für KOI-889b, Corot-3b und Gliese-229b nicht gemacht, da der nichtmetallische Bereich in diesen Objekten sehr klein ist. Für deren äußersten Punkte kann man in erster Näherung die Jupiterergebnisse nutzen, da die ersten Punkte von Jupiter (relativ zum Radius weiter Innen) thermodynamisch den äußersten Punkten der massereichen Objekte ähnlich sind und die Variation von λ_i mit der Dichte und Temperatur nicht sehr groß ist.

In den unteren beiden Bildern von Abbildung 5.6 sind die magnetische Diffusivität $\beta = 1/\mu_0\sigma$ mit der magnetischen Feldkonstanten μ_0 und die Temperaturleitfähigkeit (thermische Diffusivität) $\kappa = \lambda/\rho c_P$ zu sehen. Da β lediglich das skalierte Inverse der elektronischen Leitfähigkeit ist, gibt es im relativen Verlauf der Kurven keinen Unterschied zu σ . Im Gegenteil dazu fließt bei κ auch die Dichte und insbesondere die isobare spezifische Wärmekapazität c_P ein. Daher kommt der deutliche Unterschied zwischen den farbigen Kurven mit den gestrichelten Vergleichskurven von Stevenson, da dieser bei gleicher Dichte und Temperatur andere Werte für c_P vorhersagt als die DFT-MD-Simulationen.

Abschließend soll nun untersucht werden, ob die Werte für σ und λ konsistent zu Vorhersagen für das entartete Elektronengas sind. Dazu wird die sogenannte

Lorenz-Zahl¹⁹² betrachtet:

$$L = \frac{e^2 \lambda}{k_B^2 T \sigma} \quad (5.10)$$

Sie ist der Quotient aus thermischer und elektrischer Leitfähigkeit dividiert durch die Temperatur. Für Metalle haben Wiedemann und Franz³²³ empirisch den Wert $L_{W-F} = \frac{\pi^2}{3}$ herausgefunden, welcher später auch theoretisch über die Beschreibung des freien Elektronengases als Fermisystem belegt wurde. Dieser Wert muss auch für die entartetete Materie in den Großen Planeten und den Braunen Zwergen gelten. Im linken Bild von Abbildung 5.7 sind die entsprechenden Kurven zu sehen. Die horizontale, gestrichelte Linie ist der L_{W-F} -Grenzfall, welcher in KOI-889b (orange), Corot-3b (braun) und Gliese-229b (grün) in deren metallischem Bereich ($R \leq 0,99 R_{\text{Objekt}}$) besser als 3 % erfüllt ist. Die schwarze Jupiterkurve⁹⁹ weicht um 6% ab, was wahrscheinlich auf das noch neutrale Helium in Jupiter zurückgeführt werden kann. Die grün gestrichelte Kurve von Stevenson³⁰² sagt für alle Objekte den Wert von 3,63 vorher und weicht damit ebenfalls von L_{W-F} ab. Diese Diskrepanz lässt sich aus der entsprechenden Publikation nicht erklären.

5.2.3. Rosseland-Mittel der Opazität

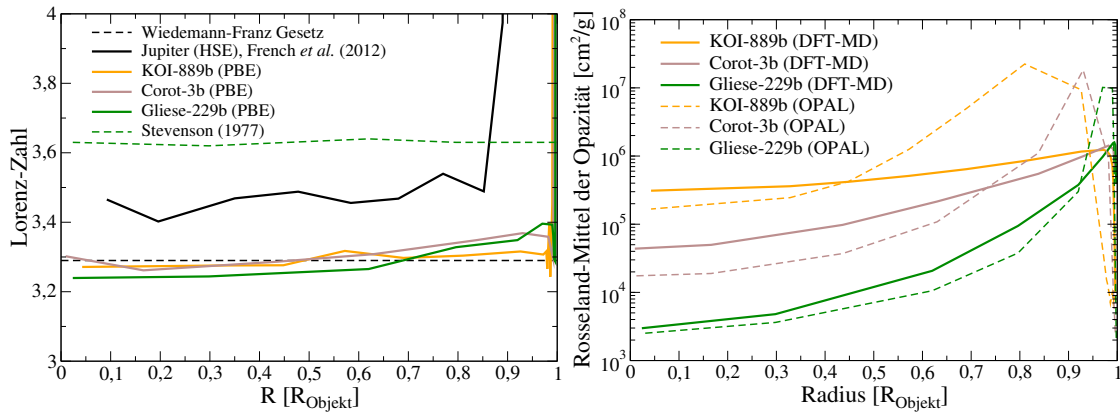


Abbildung 5.7.: Lorenzzahl $L = e^2\lambda/k_B^2T\sigma$ (linkes Bild) und das Rosseland-Mittel der Opazität κ_R (siehe Gl. 5.13, rechtes Bild ohne Jupiter) mit gleichem Farbcode wie in Bild 5.4 [A1].

Aus der frequenzabhängigen elektrischen Leitfähigkeit lassen sich weitere optische Eigenschaften berechnen^{102;137}. Der Imaginärteil der komplexen elektrischen Leit-

fähigkeit $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$ kann mittels einer Kramers-Kronig-Transformation über das Hauptwertintegral \mathcal{P}

$$\sigma_2(\omega) = -\frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int \frac{\sigma_1(\nu)\omega}{(\nu^2 - \omega^2)} d\nu \quad (5.11)$$

bestimmt werden. Die komplexe dielektrische Funktion $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ ergibt sich dann folgendermaßen aus

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \sigma_2/\epsilon_0\omega \quad \text{und} \quad \epsilon_2(\omega) = 1 - \sigma_1/\epsilon_0\omega \quad . \quad (5.12)$$

Für Absorptionseigenschaften benötigt man dann den komplexen Brechungsindex, welcher über $\epsilon(\omega)$ definiert ist: $n(\omega) + ik(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)}$. Aus dem Extinktionskoeffizienten $k(\omega)$ und der Lichtgeschwindigkeit c kann dann der frequenzabhängige Absorptionskoeffizient $\alpha(\omega) = 2\omega k(\omega)/c$ berechnet werden.

Ein Maß für die optische Dichte eines Systems ist das Rosseland-Mittel der Opazität¹⁶³:

$$\frac{1}{\kappa_R} = \frac{15}{4\pi^4} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\alpha(\omega)} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad . \quad (5.13)$$

Das Inverse des Absorptionskoeffizienten wird mit der Ableitung der Planck-Funktion nach der Temperatur gewichtet und über alle Frequenzen abintegriert. Die Größe κ_R ist beispielsweise bei der Berechnung des Energietransportes in einem Stern wichtig. Ist das Medium optisch zu dicht, kann Energie nicht mehr effektiv über Strahlung transportiert werden und es kommt zum konvektiven Energietransport (Schwarzschild-Kriterium).

Im Folgenden fließen, wie schon erwähnt, nur die elektronischen Beiträge aus den DFT-MD-Ergebnissen in die Opazität mit ein. Rotations- und Vibrationsanregungen und damit eingehende Absorption an Molekülen, wie sie in der Atmosphäre von Braunen Zwergen und Großen Planeten wichtig ist, werden nicht berücksichtigt, sodass gerade κ_R im äußeren Bereich der Objekte unterschätzt wird. Gleichmaßen wird nur die Absorption von Wasserstoff und Helium berechnet, sodass andere Absorber wie Sauerstoff, Kohlenstoff, Eisen oder Edelgase, welche nachweislich in Braunen Zwergen vorhanden sind, keine Beiträge liefern können. Als Vergleichswerte zu den DFT-MD-Opazitäten werden die OPAL-Werte (Opacity Project at Livermore) von Rogers und Iglesias^{153;154;272;273} genutzt, welche für den

stellaren Bereich entwickelt wurden und Absorptionsbeiträge von 21 Elementen berücksichtigen.

Die Ergebnisse sind im rechten Bild von Abbildung 5.7 zu sehen. Für Jupiter wurden in der entsprechenden Publikation^{99[A9]} für κ_R keine Resultate angegeben, sodass diese Berechnungen noch ausstehen. Die Opazität ist jeweils am größten, wenn es im System noch gebundene Elektronen gibt und damit Übergänge von gebundenen zu freien Zuständen (bound-free-Übergänge) stark beitragen können. Wie bei den Leitfähigkeiten schon deutlich geworden, ist dies bei Gliese-229b (grün), Corot-3b (braun) und KOI-889b am äußersten Rand der Fall, wo auch die Leitfähigkeit superexponentiell ansteigt. Je extremer die thermodynamischen Zustände im Innern, desto weiter außen ist das Maximum von κ_R und desto schneller fällt die Kurve auch ab, da Helium ebenfalls sehr schnell ionisiert. Deshalb ist bei KOI-889b mit den moderatsten inneren Bedingungen relativ zu den beiden anderen Objekten das Maximum beim kleinsten Radius und im Innern die höchste Opazität. Die OPAL-Werte haben qualitativ den gleichen Verlauf, wie die DFT-MD-Kurven, haben aber ein deutlich ausgeprägteres Maximum. Zum einen liegt das an der Berücksichtigung vieler Absorber, zum anderen aber auch an der Behandlung der Bindungszustände im chemischen Bild. Mit steigendem Druck verschwinden diese (Mott-Effekt), sodass es zu weniger Absorptionsbeiträgen zu κ_R kommt. Dieser Effekt wird im physikalischen Bild der DFT-MD genauer behandelt, sodass die schneller verschwindenden Bindungszustände in den DFT-MD-Resultaten auch zu kleineren Opazitäten führen.

5.3. Zusammenfassung von Kapitel 5

In diesem Kapitel wurden thermodynamische ($c_V, c_P, c_s, \kappa_T, \alpha$) und Transporteigenschaften ($\eta, \sigma, \lambda, \kappa_R$) entlang der Isentropen von Großen Planeten und Braunen Zwergen vorgestellt. Diese sind komplexer, je kühler die Oberflächentemperatur des Objektes ist. Beispielsweise führt die Dissoziation von Wasserstoff in Jupiter noch zu ausgeprägten Maxima der Wärmekapazitäten bei $\sim 0,9R_J$ und einen Anstieg der elektrischen Leitfähigkeit um zwölf Größenordnungen in diesem Bereich [A9]. Bei den anderen dichteren Objekten ist der superexponentielle Anstieg der

Leitfähigkeiten auf einen noch kleineren Bereich beschränkt und beträgt nur noch zwei bis vier Größenordnungen [A1]. Auch die thermodynamischen Materialeigenschaften dieser Objekte zeigen meistens nur noch ein monotones Verhalten, da das H-System unter diesen Bedingungen schon fast vollständig dissoziiert ist. Lediglich c_P und c_V sind ganz außen in den Objekten auf der abfallenden Flanke des Dissoziationsmaximums (wie bei Jupiter) und zeigen ein kleines Minima, bevor sie nahezu konstante Werte im entarteten System annehmen. Gliese-229b, Corot-3b und KOI-889b erfüllen in ihrem Innern das Wiedemann-Franz-Gesetz aufgrund der dort vorherrschenden entarteten Materie sehr gut, was gleichzeitig ein Beweis der Konsistenz der Leitfähigkeitsberechnungen ist [A1].

Die Scherviskosität wächst in allen Objekten monoton zum Zentrum an und ist größer, je größer die Masse der Braunen Zwerge oder der Großen Planeten ist.

Das Rosseland-Mittel der Opazität κ_R hat im Ionisationsbereich von Wasserstoff ganz außen in den Objekten ein Maximum, da hier noch bound-free-Übergänge der Elektronen möglich sind und nimmt dann systematisch zum Zentrum hin ab. Je weniger Masse das Objekt hat, desto höher ist κ_R im Inneren, da das ionisierende Helium noch Absorptionen zulässt.

6. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wird das Zusammenspiel zwischen *ab initio*-Simulationen für warme dichte Materie, Hochdruckexperimenten und der Physik Großer Planeten und Brauner Zwerge ausführlich untersucht und dargestellt. Dazu wurden Zustandsgleichungen für Wasserstoff und Helium konstruiert, die den nötigen Dichte-Temperaturbereich zur Modellierung Großer Planeten und Brauner Zwerge abdecken [A2]. Sie enthalten ausgedehnte Datensätze aus DFT-MD-Simulationen zur Beschreibung der warmen dichten Materie, siehe Kapitel 2. Die Implementierung der DFT-MD-Methode in VASP versagt bei kleinen Dichten, sodass vernünftige Anschlüsse zum schwach korrelierten System und idealen Gas ausgeführt wurden. Die resultierenden Zustandsgleichungen H-REOS.3 und He-REOS.3 sind in hohem Maße thermodynamisch konsistent und reproduzieren sehr gut die Ergebnisse verfügbarer Hochdruckexperimente ([A2],[A8]). Die entsprechenden Tabellen der H-REOS.3 und He-REOS.3 sind in der Online-Ausgabe von [A2] als Download verfügbar.

Des Weiteren dienen die DFT-MD-Daten zur Auswertung und Begleitung aktueller Hochdruckexperimente, wie sie in Kapitel 3 beschrieben sind. Hervorzuheben sind hier zum einen die zeitliche Auflösung der Dissoziation von Wasserstoff und die Bestimmung des Ionisationsgrades entlang der Hugoniotkurve von Deuterium mittels Thomsonstreuung, siehe Abschnitt 3.4.2, [A6] und [A7]. Der erste ernstzunehmende experimentelle Nachweis des Nichtmetall-Metall-Übergangs als Phasenübergang erster Ordnung in fluidem Wasserstoff, siehe Abschnitt 3.5 und [A3], hat zudem ein 80 Jahre altes Problem der Plasmaphysik höchstwahrscheinlich gelöst. Die lineare Mischung LM-REOS.3 wird genutzt, um Strukturmodelle und Masse-Radius-Relationen für Jupiter, und erstmals auf Basis von *ab initio*-Zustandsgleichungen für den massereichen Großen Planeten KOI-889b und die Braunen

Zwerge Corot-3b und Gliese-229b zu berechnen, siehe Kapitel 4 und [A2]. Insbesondere bei Letzterem liegt der Schwerpunkt auf den Vergleich mit Modellen, die auf der Zustandsgleichung von SCvH beruhen. Für Jupiter werden Modelle vorgestellt, welche die verfügbaren Beobachtungsdaten bezüglich des Gravitationsfeldes reproduzieren und insbesondere einen atmosphärischen Metallgehalt $Z_1 \sim 3 \times Z_{\text{solar}}$ (Häufigkeit von Kohlenstoff) vorhersagen können ([A2] und [A10]). Masse-Radius-Relationen basierend auf der SCvH-EOS sagen aufgrund der höheren Kompressibilität dieser Zustandsgleichung stets etwas kleinere Radien für die Objekte vorher, als die LM-REOS.3. Dabei sind die Unterschiede bei kleineren Massen ($M \sim 1M_J$) am größten und im Bereich Brauner Zwerge konstant bei $\sim 2,5\%$. Wegen der etwas kleineren Radien im Falle der SCvH-EOS sind die Dichten und Drücke im Inneren der massereichen Großen Planeten und der Braunen Zwerge auch um ca. 10% höher als bei den Strukturmodellen basierend auf der LM-REOS.3.

Die Isentropen dieser Strukturmodelle dienen dann zur Berechnung von Materialeigenschaften wie den Wärmekapazitäten, Schallgeschwindigkeiten, elektrischen und thermischen Leitfähigkeiten, Opazitäten und Viskositäten im Innern dieser Objekte, siehe Kapitel 5, [A1] sowie [A9]. Dabei stellt sich immer ein systematisches Verhalten der Größen in Abhängigkeit von der Masse der Objekte heraus. Beispielsweise gilt $\sigma_{\text{Jupiter}} < \sigma_{\text{KOI-889b}} < \sigma_{\text{Corot-3b}} < \sigma_{\text{Gliese-229b}}$. Diese Materialeigenschaften können als Input für die Magnetfeldberechnungen der Objekte dienen, wie in [A5] ausgeführt. Außerdem können durch Interpolation des vorgestellten Datensatzes die thermodynamischen Zustände und die entsprechenden Materialeigenschaften im Innern von Großen Planeten und Braunen Zwergen mit Massen zwischen $1 M_J$ und $46 M_J$ näherungsweise bestimmt werden.

Neben den Magnetfeldsimulationen führen die Ergebnisse dieser Arbeit aber auch auf weitere Problemfelder, von denen hier einige konkret genannt werden sollen. Beispielsweise beinhalten die H-REOS.3 und He-REOS.3 derzeit die thermische $P(\varrho, T)$ und kalorische $u(\varrho, T)$ Zustandsgleichung. Das genügt zwar, um Isentropen zu berechnen, jedoch ist die volle Information über die Entropie $s(\varrho, T)$ nötig, um unter anderem die Lage von Phasenübergängen (Koexistenzlinien) genau berechnen zu können und die freie Energie $f(\varrho, T)$ zu konstruieren. Die Entropie kann über thermodynamische Integration^{165;233;305} der DFT-MD-Daten über ein

Referenzsystem bis hin zum idealen Gas berechnet werden. Alternativ hat Desjarlais auch eine Methode zur Berechnung der Entropie über die Geschwindigkeits-Autokorrelationsfunktion und dem zugehörigen Spektrum vorgestellt⁷⁰, welche in Zukunft auch für die Berechnung der Entropie in der H-REOS.3 und He-REOS.3 genutzt werden könnte.

Zur Verbesserung der Zustandsgleichungen muss auch der Einfluss von Austausch-Korrelations-Funktionalen für endliche Temperaturen, welche über die lokale Dichtenäherung (LDA)¹⁵⁹ hinaus gehen, untersucht werden. Die entsprechenden Implementierungen sind jedoch noch in der Entwicklungsphase²⁹³. Außerdem legen die Experimente zum Nichtmetall-Metall-Übergang nahe, den Einfluss von Dispersionskräften über den gesamten Dichte- und Temperaturbereich zu prüfen, wobei insbesondere die Formulierung dieser Kräfte im metallischen Bereich eine Herausforderung ist³¹². Da die Metallisierung des Wasserstoff-Subsystems in H-He-Mischungen ein Katalysator für deren Entmischung ist, betrifft das Problem der Dispersionskräfte auch direkt die Modellierung der Evolution von Saturn²⁶² und Jupiter²⁴⁴ und sollte auch diesbezüglich weiter untersucht werden.

Bezüglich der Hugoniotkurve von Helium steht eine erneute Auswertung der Egger *et al.*⁸³-Daten auf Grundlage des neuen Quartz-EOS-Standards¹⁶⁶ und der entsprechende Vergleich mit den DFT-MD-Daten aus. Dabei sollte für Helium auch die große Diskrepanz in der Temperatur zwischen den Ergebnissen der experimentellen quasi-isentropen Kompressionen und den entsprechenden Vorhersagen auf Basis der He-REOS.3, siehe Abschnitt 3.3, durch neue Experimente geklärt werden.

Für die Großen Planeten und Braunen Zwerge sollten in Zukunft Modelle benutzt werden, welche die komplexen Atmosphären besser behandeln und auch die Evolution dieser Objekte mit berücksichtigen können. Dabei sollten die nuklearen Fusionsreaktionen in der frühen Entwicklungsphase Brauner Zwerge⁴³ genauso in Betracht gezogen werden, wie die Rückkopplung des Magnetfeldes auf die Zustandsgleichung und damit auf das Innere der Objekte. Insbesondere durch die Verwendung komplexerer Atmosphärenmodelle und gemessener Spektren können auch anomale Radien, wie beispielsweise bei Corot-15b⁴² auch mit der LM-REOS.3 beschrieben werden.

Des Weiteren steht für Braune Zwerge noch ein differenziertes und allgemein anerkanntes Kriterium zur Abgrenzung dieser Objekte bezüglich der massereichen Großen Planeten aus. Insbesondere die Annahme eines Ein-Schicht-Modells in Kapitel 4 für BDs und MGPs aufgrund des überlappenden Massebereiches, siehe Abbildung 1.1 sollte unter diesem Aspekt noch einmal untersucht werden.

A. Tabellen zu den isentropen Kompressionsexperimenten

Tabelle A.1.: Ergebnisse aus der H-REOS.3 für Druck und Temperatur bei einer isentropen Kompression von Deuterium bezüglich der gemessenen Dichte. Die gerechneten Ergebnisse aus den entsprechenden Veröffentlichungen sind in Klammern unter den DFT-MD-Resultaten zu sehen. Hier sei angemerkt, dass die Daten von Fortov *et al.*⁹⁶ auf zwei verschiedenen EOS-Modellen basieren (Werte in Klammern) und die Drücke bei Boriskov *et al.*²⁹ über eine Aluminiumreferenz¹¹¹ gemessen sind.

Datenpunkte	Fortov <i>et al.</i> ⁹⁶		
	ρ (g/cm ³)	T (K)	P (GPa)
1	1,09	890	55
		(3100;2180)	(77)
2	1,36	950	91
		(3850;2500)	(127)
3	1,78	1030	164
		(4100;2600)	(150)
4	2,35	1140	315
		(5200;...)	(255)
5	2,46	1160	352
		(...;2410)	(302)
1	4,3	Mochalov <i>et al.</i> ²²¹	
		1470	1300
		(3500)	(1800)
1	1,29	Boriskov <i>et al.</i> ²⁹	
		200	75
		(<300)	(89)
2	1,73	280	154
		(<300)	(175)
3	2,13	295	245
		(<300)	(290)
4	2,77	330	461
		(<300)	(420)
5	2,97	335	536
		(<300)	(540)

Tabelle A.2.: Ergebnisse aus der He-REOS.3 für Druck und Temperatur bei einer isentropen Kompression von Helium bezüglich der gemessenen Dichte. Die gerechneten Ergebnisse aus den entsprechenden Veröffentlichungen sind in Klammern unter den DFT-MD-Resultaten zu sehen.

Datenpunkte	Zhernokletov <i>et al.</i> ³³⁶		
	ρ (g/cm ³)	T (K)	P (GPa)
S1	1,32 ± 0,05	13800	115
	(1,3)	(17000)	(126 ± 10)
S2	1,68 ± 0,08	19800	212
	(1,64)	(24800)	(240 ± 27)
S3	1,74 ± 0,05	22100	238
	(1,63)	(26700)	(246 ± 15)
S4	2,19 ± 0,07	30700	413
	(2,14)	(35600)	(460 ± 34)
	Mochalov <i>et al.</i> ²²²		
He-1	3,8 ± 0,9	17000	926
	(3,4)	(74000)	(1580)
He-2	8,4 ± 1,9	23600	4636
	(7,2)	(74000)	(4750)
He-3	4,0 ± 0,4	13700	970
	(4,5)	(59000)	(1950)

B. Tabellen zu den Materialeigenschaften

Tabelle B.1.: Thermodynamische Materialeigenschaften im Innern von Gliese-229b. Dieser Braune Zwerg hat eine Masse von $46,23 M_{\text{Jup}}$ und einen Radius von $0,8646 R_{\text{Jup}}$.

m [M_{Obj}]	P [GPa]	r [R_{Obj}]	T [K]	ρ [g/cm ³]	α [1/K]	κ_T [1/GPa]	c_V [kJ/gK]	c_P [kJ/gK]	c_s [km/s]
1,0000e+00	5,7630e+00	9,9804e-01	8,0213e+03	1,2597e-01	9,4977e-05	1,3241e-01	1,9486e-02	2,4195e-02	8,5859e+00
9,9998e-01	6,1680e+01	9,9604e-01	1,3341e+04	4,6240e-01	3,4070e-05	9,4307e-03	1,4469e-02	1,8378e-02	1,6797e+01
9,9994e-01	1,7678e+02	9,9404e-01	1,8452e+04	7,3751e-01	2,0674e-05	3,2045e-03	1,3148e-02	1,6903e-02	2,2682e+01
9,9988e-01	3,4403e+02	9,9204e-01	2,2661e+04	1,0010e+00	1,4876e-05	1,6841e-03	1,3383e-02	1,6741e-02	2,6460e+01
9,9980e-01	5,6239e+02	9,9004e-01	2,6470e+04	1,2642e+00	1,1500e-05	1,0277e-03	1,3599e-02	1,6676e-02	2,9851e+01
9,9809e-01	5,7946e+03	9,7004e-01	5,7847e+04	4,1132e+00	3,8477e-06	1,0397e-04	1,4193e-02	1,6462e-02	5,0653e+01
9,8537e-01	5,1010e+04	9,2004e-01	1,2937e+05	1,3359e+01	1,4594e-06	1,2127e-05	1,4565e-02	1,6500e-02	8,1727e+01
8,9431e-01	5,2007e+05	7,9603e-01	2,7955e+05	5,0583e+01	5,2277e-07	1,2058e-06	1,4092e-02	1,5493e-02	1,3153e+02
6,3427e-01	2,8769e+06	6,2003e-01	5,3100e+05	1,3617e+02	2,6455e-07	2,2054e-07	1,3835e-02	1,5197e-02	1,9084e+02
1,1551e-01	1,4323e+07	2,9801e-01	9,7316e+05	3,4905e+02	1,4381e-07	4,4440e-08	1,4411e-02	1,5741e-02	2,6498e+02
6,8400e-05	2,2139e+07	2,3668e-02	1,1769e+06	4,4735e+02	1,2637e-07	2,9324e-08	1,4815e-02	1,6252e-02	2,8952e+02

Tabelle B.2.: Transporteigenschaften im Innern von Gliese-229b.

m [M_{Obj}]	r [R_{Obj}]	T [K]	σ [S/m]	β [m ² /s]	λ [W/Km]	κ [m ² /s]	η [mPas]	ν [mm ² /s]	κ_R [cm ² /g]
1,0000e+00	9,9804e-01	8,0213e+03	3,2400e+03	2,4561e+02	1,4011e+00	4,5969e-07	1,3605e-01	1,0800e+00	3,8810e+05
9,9998e-01	9,9604e-01	1,3341e+04	2,2790e+05	3,4918e+00	7,0413e+01	8,2860e-06	4,3523e-01	9,4123e-01	1,4453e+06
9,9994e-01	9,9404e-01	1,8452e+04	4,9937e+05	1,5936e+00	2,2402e+02	1,7970e-05	7,7248e-01	1,0474e+00	1,5866e+06
9,9988e-01	9,9204e-01	2,2661e+04	7,4660e+05	1,0659e+00	4,2201e+02	2,5184e-05	9,0479e-01	9,0392e-01	1,5615e+06
9,9980e-01	9,9004e-01	2,6470e+04	9,9143e+05	8,0265e-01	6,6329e+02	3,1463e-05	1,0778e+00	8,5255e-01	1,5049e+06
9,9809e-01	9,7004e-01	5,7847e+04	3,4733e+06	2,2911e-01	5,0755e+03	7,4959e-05	3,1824e+00	7,7369e-01	9,7216e+05
9,8537e-01	9,2004e-01	1,2937e+05	1,0104e+07	7,8758e-02	3,2216e+04	1,4616e-04	1,1112e+01	8,3182e-01	3,7732e+05
8,9431e-01	7,9603e-01	2,7955e+05	3,8363e+07	2,0743e-02	2,6380e+05	3,3661e-04	4,1002e+01	8,1058e-01	9,4198e+04
6,3427e-01	6,2003e-01	5,3100e+05	9,0011e+07	8,8409e-03	1,1891e+06	5,7461e-04	1,2644e+02	9,2849e-01	2,0714e+04
1,1551e-01	2,9801e-01	9,7316e+05	1,9453e+08	4,0908e-03	4,3787e+06	7,9694e-04	(2,84e+02)	(8,137e-01)	4,7956e+03
6,8400e-05	2,3668e-02	1,1769e+06	2,3235e+08	3,4249e-03	6,4194e+06	8,8295e-04	(3,68e+02)	(8,226e-01)	2,9823e+03

Tabelle B.3.: Thermodynamische Materialeigenschaften im Innern von KOI-889b. Dieser massereiche Große Planet hat eine Masse von $9,98 M_{\text{Jup}}$ und einen Radius von $1,028 R_{\text{Jup}}$.

m [M_{Obj}]	P [GPa]	r [R_{Obj}]	T [K]	ρ [g/cm ³]	α [1/K]	κ_T [1/GPa]	c_V [kJ/gK]	c_P [kJ/gK]	c_s [km/s]
9,9996e-01	2,5345e+00	9,9596e-01	4,8122e+03	1,0001e-01	1,3276e-04	2,8809e-01	1,3383e-02	1,6280e-02	6,4834e+00
9,9989e-01	7,4679e+00	9,9396e-01	5,7198e+03	1,8567e-01	7,9348e-05	8,7599e-02	1,4393e-02	1,6659e-02	8,3606e+00
9,9977e-01	1,5577e+01	9,9196e-01	6,4396e+03	2,8099e-01	5,8260e-05	4,0203e-02	1,2943e-02	1,4780e-02	9,9351e+00
9,9960e-01	2,7174e+01	9,8996e-01	7,0650e+03	3,8050e-01	5,0885e-05	2,2195e-02	1,0828e-02	1,3021e-02	1,1687e+01
9,9911e-01	6,0725e+01	9,8596e-01	8,2715e+03	5,6302e-01	3,7899e-05	8,5432e-03	1,2989e-02	1,5708e-02	1,5546e+01
9,9880e-01	8,2054e+01	9,8396e-01	8,9562e+03	6,4046e-01	3,3131e-05	6,1498e-03	1,2191e-02	1,5006e-02	1,7266e+01
9,9808e-01	1,3285e+02	9,7996e-01	1,0329e+04	7,8324e-01	2,5347e-05	3,7621e-03	1,2174e-02	1,4679e-02	1,9755e+01
9,9766e-01	1,6212e+02	9,7796e-01	1,0989e+04	8,5028e-01	2,2631e-05	3,0658e-03	1,2276e-02	1,4648e-02	2,0901e+01
9,9624e-01	2,6466e+02	9,7196e-01	1,3126e+04	1,0414e+00	1,7693e-05	1,9293e-03	1,2468e-02	1,4698e-02	2,3626e+01
9,7695e-01	1,8201e+03	9,2596e-01	2,5174e+04	2,5392e+00	6,7208e-06	3,0183e-04	1,3360e-02	1,5055e-02	3,7223e+01
8,7021e-01	1,3655e+04	8,0997e-01	4,9980e+04	7,1726e+00	2,6416e-06	4,2462e-05	1,4124e-02	1,5442e-02	5,8232e+01
6,9210e-01	4,3132e+04	6,8997e-01	7,5221e+04	1,3412e+01	1,5250e-06	1,3633e-05	1,3667e-02	1,4779e-02	7,4824e+01
4,8476e-01	9,3973e+04	5,7198e-01	1,0013e+05	2,0630e+01	1,0976e-06	6,3116e-06	1,3699e-02	1,4829e-02	8,8699e+01
2,7759e-01	1,6964e+05	4,4798e-01	1,2499e+05	2,8609e+01	8,3221e-07	3,5255e-06	1,3692e-02	1,4686e-02	1,0062e+02
1,2419e-01	2,5494e+05	3,2799e-01	1,4509e+05	3,6048e+01	6,9485e-07	2,3536e-06	1,3838e-02	1,4778e-02	1,0957e+02
3,1541e-04	3,9739e+05	4,2637e-02	1,6621e+05	4,6560e+01	5,7487e-07	1,5127e-06	1,4099e-02	1,4995e-02	1,2002e+02

Tabelle B.4.: Transporteigenschaften im Innern von KOI-889b.

m [M_{Obj}]	r [R_{Obj}]	T [K]	σ [S/m]	β [m ² /s]	λ [W/Km]	κ [m ² /s]	η [mPas]	ν [mm ² /s]	κ_R [cm ² /g]
9,9996e-01	9,9596e-01	4,8122e+03	3,3706e+01	2,3609e+04	2,1496e-02	1,3203e-08	7,7596e-02	7,7591e-01	1,0202e+04
9,9989e-01	9,9396e-01	5,7198e+03	9,8230e+02	8,1011e+02	3,6373e-01	1,1760e-07	1,1220e-01	6,0433e-01	8,8482e+04
9,9977e-01	9,9196e-01	6,4396e+03	2,4000e+04	3,3157e+01	3,3282e+00	8,0138e-07	1,4140e-01	5,0323e-01	4,2252e+05
9,9960e-01	9,8996e-01	7,0650e+03	8,9000e+04	8,9413e+00	1,1601e+01	2,3415e-06	2,0427e-01	5,3686e-01	7,3242e+05
9,9911e-01	9,8596e-01	8,2715e+03	2,7866e+05	2,8557e+00	4,9759e+01	5,6264e-06	3,1175e-01	5,5370e-01	9,9637e+05
9,9880e-01	9,8396e-01	8,9562e+03	3,5200e+05	2,2607e+00	7,4769e+01	7,7799e-06	3,4784e-01	5,4310e-01	1,0546e+06
9,9808e-01	9,7996e-01	1,0329e+04	5,3874e+05	1,4771e+00	1,2800e+02	1,1133e-05	4,2820e-01	5,4670e-01	1,1599e+06
9,9766e-01	9,7796e-01	1,0989e+04	6,0810e+05	1,3086e+00	1,5751e+02	1,2646e-05	4,8184e-01	5,6668e-01	1,1798e+06
9,9624e-01	9,7196e-01	1,3126e+04	8,1870e+05	9,7200e-01	2,5001e+02	1,6333e-05	5,8126e-01	5,5814e-01	1,2321e+06
9,7695e-01	9,2596e-01	2,5174e+04	2,3580e+06	3,3748e-01	1,5322e+03	4,0081e-05	1,3089e+00	5,1549e-01	1,1628e+06
8,7021e-01	8,0997e-01	4,9980e+04	7,4425e+06	1,0692e-01	9,6461e+03	8,7092e-05	3,4012e+00	4,7419e-01	8,4873e+05
6,9210e-01	6,8997e-01	7,5221e+04	1,4200e+07	5,6040e-02	2,7698e+04	1,3973e-04	6,4088e+00	4,7782e-01	6,4096e+05
4,8476e-01	5,7198e-01	1,0013e+05	2,1263e+07	3,7425e-02	5,6124e+04	1,8346e-04	1,0150e+01	4,9196e-01	5,1131e+05
2,7759e-01	4,4798e-01	1,2499e+05	2,9219e+07	2,7235e-02	9,9199e+04	2,3610e-04	1,4212e+01	4,9674e-01	4,1928e+05
1,2419e-01	3,2799e-01	1,4509e+05	3,7152e+07	2,1419e-02	1,4266e+05	2,6780e-04	1,8254e+01	5,0638e-01	3,6061e+05
3,1541e-04	4,2637e-02	1,6621e+05	4,6115e+07	1,7256e-02	2,0302e+05	2,9079e-04	2,3555e+01	5,0590e-01	3,0982e+05

Tabelle B.5.: Thermodynamische Materialeigenschaften im Innern von Corot-3b. Dieser Braune Zwerg hat eine Masse von $22,66 M_{\text{Jup}}$ und einen Radius von $0,973 R_{\text{Jup}}$.

m [M_{Obj}]	P [GPa]	r [R_{Obj}]	T [K]	ρ [g/cm ³]	α [1/K]	κ_T [1/GPa]	c_V [kJ/gK]	c_P [kJ/gK]	c_s [km/s]
9,5584e-01	1,1265e+01	9,9600e-01	7,7490e+03	2,0755e-01	6,5253e-05	6,0297e-02	1,6590e-02	1,9471e-02	9,5992e+00
9,5569e-01	7,2973e+01	9,9200e-01	1,1247e+04	5,4773e-01	3,2399e-05	7,3659e-03	1,3253e-02	1,6459e-02	1,7242e+01
9,5486e-01	4,2409e+02	9,8200e-01	1,9866e+04	1,1780e+00	1,3320e-05	1,2901e-03	1,3081e-02	1,5694e-02	2,7343e+01
9,4160e-01	6,8870e+03	9,3000e-01	5,0678e+04	4,6996e+00	3,5525e-06	8,5161e-05	1,3944e-02	1,5737e-02	5,1766e+01
8,8115e-01	4,6044e+04	8,3800e-01	1,0057e+05	1,3154e+01	1,5231e-06	1,3113e-05	1,4130e-02	1,5686e-02	7,8308e+01
5,9924e-01	3,7454e+05	6,3000e-01	1,9982e+05	4,3210e+01	6,0019e-07	1,6361e-06	1,4937e-02	1,6092e-02	1,2090e+02
2,7400e-01	1,1162e+06	4,3600e-01	2,9954e+05	8,0878e+01	3,6886e-07	5,5275e-07	1,3554e-02	1,4587e-02	1,5208e+02
1,9537e-02	2,4201e+06	1,6600e-01	4,0002e+05	1,2654e+02	2,6420e-07	2,5623e-07	1,3357e-02	1,4347e-02	1,7844e+02
3,0679e-05	2,7600e+06	9,2899e-03	4,2038e+05	1,3659e+02	2,6715e-07	2,2668e-07	1,3593e-02	1,4635e-02	1,8647e+02

Tabelle B.6.: Transporteigenschaften im Innern von Corot-3b.

m [M_{Obj}]	r [R_{Obj}]	T [K]	σ [S/m]	β [m ² /s]	λ [W/Km]	κ [m ² /s]	η [mPas]	ν [mm ² /s]	κ_R [cm ² /g]
9,5584e-01	9,9600e-01	7,7490e+03	1,5000e+04	5,3052e+01	3,0961e+00	7,6611e-07	1,4930e-01	7,1933e-01	5,6073e+05
9,5569e-01	9,9200e-01	1,1247e+04	2,9209e+05	2,7244e+00	7,4813e+01	8,2987e-06	4,2955e-01	7,8424e-01	1,2715e+06
9,5486e-01	9,8200e-01	1,9866e+04	9,4121e+05	8,4548e-01	4,6279e+02	2,5034e-05	8,6711e-01	7,3610e-01	1,4217e+06
9,4160e-01	9,3000e-01	5,0678e+04	4,5461e+06	1,7505e-01	5,8936e+03	7,9691e-05	2,9139e+00	6,2004e-01	9,9285e+05
8,8115e-01	8,3800e-01	1,0057e+05	1,3471e+07	5,9073e-02	3,4664e+04	1,6800e-04	8,7789e+00	6,6737e-01	5,4836e+05
5,9924e-01	6,3000e-01	1,9982e+05	4,3080e+07	1,8472e-02	2,1381e+05	3,0750e-04	2,8903e+01	6,6889e-01	2,1526e+05
2,7400e-01	4,3600e-01	2,9954e+05	7,4478e+07	1,0685e-02	5,6667e+05	4,8032e-04	5,4965e+01	6,7961e-01	9,7749e+04
1,9537e-02	1,6600e-01	4,0002e+05	1,1648e+08	6,8319e-03	1,1198e+06	6,1679e-04	8,6651e+01	6,8477e-01	4,9752e+04
3,0679e-05	9,2899e-03	4,2038e+05	1,2646e+08	6,2927e-03	1,2540e+06	6,2730e-04	9,2783e+01	6,7926e-01	4,3816e+04

Literaturverzeichnis

- [1] Siehe <http://spider.ipac.caltech.edu/staff/davy/ARCHIVE/index.shtml>.
- [2] siehe <http://exoplanet.eu/catalog/>.
- [3] see <http://smsc.cnes.fr/COROT/>.
- [4] AKIMA, H. A New Method of Interpolation and Smooth Curve Fitting Based on Local Procedures. *Journal of the Association for Computing Machinery* 17 (1970), 589.
- [5] ALFÈ, D., AND GILLAN, M. J. First-Principles Calculation of Transport Coefficients. *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998), 5161.
- [6] ALLARD, F., HAUSCHILDT, P. H., BARAFFE, I., AND CHABRIER, G. Synthetic Spectra and Mass Determination of the Brown Dwarf Gliese 229B. *The Astrophysical Journal Letters* 465 (1996), L123.
- [7] ALLEN, M. P., AND TILDESLEY, D. J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1989.
- [8] ANDERSON, D. R., CAMERON, A. C., HELLIER, C., LENDL, M., MAXTED, P. F. L., POLLACCO, D., QUELOZ, D., SMALLEY, B., SMITH, A. M. S., TODD, I., TRIAUD, A. H. M. J., WEST, R. G., BARROS, S. C. C., ENOCH, B., GILLON, M., LISTER, T. A., PEPE, F., SÉGRANSAN, D., STREET, R. A., AND UDRY, S. WASP-30b: A $61 M_{\text{Jup}}$ Brown Dwarf transiting a $V = 12$, F8 star. *The Astrophysical Journal Letters* 726 (2011), L19.
- [9] APAI, D., RADIGAN, J., BUENZLI, E., BURROWS, A., REID, I. N., AND JAYAWARDHANA, R. HST Spectral Mapping of L/T Transition Brown

- Dwarfs Reveals Cloud Thickness Variations. *The Astrophysical Journal* 768 (2013), 121.
- [10] BAGLIN, A., AUVERGNE, M., BARGE, P., DELEUIL, M., AND MICHEL, E. CoRoT: Description of the Mission and Early Results. In *Transiting Planets*, vol. 4 of *Proceedings of the International Astronomical Union*. 5 2008, p. 71.
- [11] BAHCALL, J. N., PINSONNEAULT, M. H., AND WASSERBURG, G. J. Solar models with helium and heavy-element diffusion. *Rev. Mod. Phys.* 67 (1995), 781.
- [12] BALDERESCHI, A. Mean-Value Point in the Brillouin Zone. *Phys. Rev. B* 7 (1973), 5212.
- [13] BARAFFE, I. *50 Years of Brown Dwarfs*, vol. 401 of *Astrophysics and Space Science Library*. Springer International Publishing, 2014, ch. Latest News on the Physics of Brown Dwarfs, p. 141.
- [14] BARAFFE, I., CHABRIER, G., ALLARD, F., AND HAUSCHILDT, P. H. Evolutionary models for solar metallicity low-mass stars: mass-magnitude relationships and colour- magnitude diagrams. *A&A* 337 (1998), 403.
- [15] BARAFFE, I., CHABRIER, G., BARMAN, T. S., ALLARD, F., AND HAUSCHILDT, P. H. Evolutionary models for cool brown dwarfs and extrasolar giant planets. The case of HD 209458. *A&A* 402 (2003), 701.
- [16] BASRI, G. Observations of Brown Dwarfs. *Ann. Rev* 38 (2000), 485.
- [17] BECKER, A., BETHKENHAGEN, M., WICHT, J., AND REDMER, R. Material properties for the interiors of massive Giant Planets and Brown Dwarfs. in Vorbereitung.
- [18] BECKER, A., LORENZEN, W., FORTNEY, J., NETTELMANN, N., SCHÖTTLER, M., AND REDMER, R. Ab initio equations of states for hydrogen (H-REOS.3) and helium (He-REOS.3) and their implications for the interiors of Brown Dwarfs. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 215 (2014), 21.

- [19] BECKER, A., NETTELMANN, N., HOLST, B., AND REDMER, R. Isentropic compression of hydrogen - probing conditions deep in planetary interiors. *Phys. Rev. B* 88 (2013), 045122.
- [20] BECKLIN, E. E., AND ZUCKERMANN, B. A. A low-temperature companion to a white dwarf star. *Nature* 336 (1988), 656.
- [21] BERNU, B., AND VIEILLEFOSSE, P. Transport coefficients of the classical one-component plasma. *Phys. Rev. A* 18 (1978), 2345.
- [22] BERTOLINI, D., DEMMEL, F., AND TANI, A. Temperature dependence of de Gennes narrowing and transport properties of liquid rubidium: Experimental and simulation results. *Phys. Rev. B* 76 (2007), 094204.
- [23] BETHKENHAGEN, M., FRENCH, M., AND REDMER, R. Equation of State and Phase Diagram of Ammonia at High Pressures from Ab initio Simulations. *J. Chem. Phys.* 138 (2013), 234504.
- [24] BICH, E., HELLMANN, R., AND VOGEL, E. Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of the dilute helium gas. II. Thermophysical standard values for low-density helium. *Mol. Phys.* 105 (2007), 3035.
- [25] BLÖCHL, P. E. Projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B* 50 (1994), 17953.
- [26] BODENHEIMER, P., D'ANGELO, G., LISSAUER, J. J., FORTNEY, J. J., AND SAUMON, D. Deuterium Burning in Massive Giant Planets and Low-mass Brown Dwarfs Formed by Core-nucleated Accretion. *The Astrophysical Journal* 770 (2013), 120.
- [27] BOHM, D., AND GROSS, E. Theory of Plasma Oscillations. A. Origin of Medium-Like Behavior. *Phys. Rev.* 75 (1949), 1851.
- [28] BORISKOV, G., BYKOV, A., IL'KAEV, R., SELEMIR, V., SIMAKOV, G., TRUNIN, R., URLIN, V., FORTOV, V., AND SHUIKIN, A. Shock-wave compression of solid deuterium at a pressure of 120 GPa. *Doklady Physics* 48, 10 (2003), 553.

- [29] BORISKOV, G. V., BYKOV, A. I., EGOROV, N. I., DOLOTENKO, M. I., PAVLOV, V. N., AND TIMAREVA, V. I. Isentropic compression of substances using ultra-high magnetic fields: Zero isotherms of protium and deuterium in pressure range up to 5 Mbar. *Contrib. Plasma Phys.* 51 (2011).
- [30] BORISKOV, G. V., BYKOV, A. I., IL'KAEV, R. I., SELEMIR, V. D., SIMAKOV, G. V., TRUNIN, R. F., URLIN, V. D., SHUIKIN, A. N., AND NELLIS, W. J. Shock compression of liquid deuterium up to 109 GPa. *Phys. Rev. B* 71 (2005), 092104.
- [31] BORN, M., AND OPPENHEIMER, R. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik* 84 (1927), 457.
- [32] BORUCKI, W., AND ET AL. Kepler Planet-Detection Mission: Introduction and First Results. *Science* 327 (2010), 977.
- [33] BOSS, A. P. Rapid Formation of Outer Giant Planets by Disk Instability. *The Astrophysical Journal*. 599 (2003), 577.
- [34] BOUCHY, F., BONOMO, A. S., SANTERNE, A., MOUTOU, C., DELEUIL, M., DÍAZ, R. F., EGGENBERGER, A., EHRENREICH, D., GRY, C., GUILLOT, T., HAVEL, M., HÉBRARD, G., AND UDRY, S. SOPHIE velocimetry of Kepler transit candidates - III. KOI-423b: an 18 MJup transiting companion around an F7IV star. *A&A* 533 (2011), A83.
- [35] BOUCHY, F., DELEUIL, M., GUILLOT, T., AIGRAIN, S., CARONE, L., COCHRAN, W. D., ALMENARA, J. M., ALONSO, R., AUVERGNE, M., BAGLIN, A., BARGE, P., BONOMO, A. S., BORDÉ, P., CSIZMADIA, SZ., DE BONDT, K., DEEG, H. J., DÍAZ, R. F., DVORAK, R., ENDL, M., ERIKSON, A., FERRAZ-MELLO, S., FRIDLUND, M., GANDOLFI, D., GAZZANO, J. C., GIBSON, N., GILLON, M., GUENTHER, E., HATZES, A., HAVEL, M., HÉBRARD, G., JORDA, L., LÉGER, A., LOVIS, C., LLEBARRIA, A., LAMMER, H., MACQUEEN, P. J., MAZEH, T., MOUTOU, C., OFIR, A., OLLIVIER, M., PARVIAINEN, H., PÄTZOLD, M., QUELOZ, D., RAUER, H., ROUAN, D., SANTERNE, A., SCHNEIDER, J., TINGLEY, B., AND WUCHTERL, G. Transiting exoplanets from the CoRoT space mission

- XV. CoRoT-15b: a brown-dwarf transiting companion. *A&A* 525 (2011), A68.
- [36] BROWNING, M. K. Simulations of dynamo action in fully convective stars. *The Astrophysical Journal* 676 (2008), 1262.
- [37] BROWNING, M. K., BASRI, G., MARCY, G. W., WEST, A. A., AND ZHANG, J. Rotation and magnetic activity in a sample of M-dwarfs. *The Astronomical Journal* 139 (2010), 504.
- [38] BRYGOO, S. *Persönliche Mitteilung* (2014).
- [39] BUENZLI, E., APAI, D., RADIGAN, J., REID, I. N., AND FLATEAU, D. Brown Dwarf Photospheres are Patchy: A Hubble Space Telescope Near-infrared Spectroscopic Survey Finds Frequent Low-level Variability. *The Astrophysical Journal* 782 (2014), 77.
- [40] BURGASSER, A. J., MARLEY, M. S., ACKERMAN, A. S., SAUMON, D., LODDERS, K., DAHN, C. C., HARRIS, H. C., AND KIRKPATRICK, J. D. Evidence of Cloud Disruption in the L/T Dwarf Transition. *The Astrophysical Journal Letters* 571 (2002), L151.
- [41] BURKE, K. Perspective on density functional theory. *J. Chem. Phys.* 136 (2012), 150901.
- [42] BURROWS, A., HENG, K., AND NAMPAISARN, T. The Dependence of Brown Dwarf Radii on Atmospheric Metallicity and Clouds: Theory and Comparison with Observations. *The Astrophysical Journal* 736 (2011), 47.
- [43] BURROWS, A., HUBBARD, W., LUNINE, J., AND LIEBERT, J. The theory of brown dwarfs and extrasolar giant planets. *Rev. Mod. Phys.* 73 (2001), 719.
- [44] CAILLABET, L. *Equation d'état ab initio de l'hydrogène dans la matière dense et tiède et application à l'implosion de cibles pour la fusion pour le confinement inertiel*. PhD thesis, L'École Polytechnique, 2011.

- [45] CAILLABET, L., MAZEVET, S., AND LOUBEYRE, P. Multiphase equation of state of hydrogen from *ab initio* calculations in the range 0.2 to 5 g/cc up to 10 eV. *Phys. Rev. B* 83 (2011), 094101.
- [46] CAMPBELL, J., AND SYNNOTT, S. Gravity field of the Jovian system from Pioneer and Voyager tracking data. *Astronom. J.* 90 (1985), 364.
- [47] CAMPBELL, J., AND SYNNOTT, S. Gravity field of the Saturnian system from Pioneer and Voyager tracking data. *Astronom. J.* 97 (1989), 1485.
- [48] CEBULLA, D., AND REDMER, R. Ab initio calculations of MgO under extreme conditions. *Phys. Rev. B* 89 (2014), 134107.
- [49] CELLIERS, P. M., COLLINS, G. W., DASILVA, L. B., GOLD, D. M., CAUBLE, R., WALLACE, R. J., FOORD, M. E., AND HAMMEL, B. A. Shock-induced transformation of liquid deuterium into a metallic fluid. *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), 5564.
- [50] CELLIERS, P. M., LOUBEYRE, P., EGGERT, J. H., BRYGOO, S., MCWILLIAMS, R. S., HICKS, D. G., BOEHLY, T. R., JEANLOZ, R., AND COLLINS, G. W. Insulator-to-Conducting Transition in Dense Fluid Helium. *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010), 184503.
- [51] CENCEK, W., PATKOWSKI, K., AND SZALEWICZ, K. Full-configuration-interaction calculation of three-body nonadditive contribution to helium interaction potential. *Journal of Chemical Physics* 131 (2009), 064105.
- [52] CENCEK, W., PRZYBYTEK, M., KOMASA, J., MEHL, J. B., JEZIORSKI, B., AND SZALEWICZ, K. Effects of adiabatic, relativistic, and quantum electrodynamics interactions on the pair potential and thermophysical properties of helium. *Journal of Chemical Physics* 136 (2012), 224303.
- [53] CHABRIER, G. An equation of state for fully ionized hydrogen. *J. Phys. France* 51 (1990), 1607.
- [54] CHABRIER, G., GALLARDO, J., AND BARAFFE, I. Evolution of low-mass star and brown dwarf eclipsing binaries. *A&A* 472 (2007), L17.

- [55] CHABRIER, G., LECONTE, J., AND BARAFFE, I. Understanding exoplanet formation, structure and evolution in 2010. In *The Astrophysics of Planetary Systems: Formation, Structure, and Dynamical Evolution* (10 2010), vol. 6 of *Proceedings of the International Astronomical Union*, p. 171.
- [56] CHABRIER, G., AND POTEKHIN, A. Y. Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas. *Phys. Rev. E* 58 (1998), 4941.
- [57] CHABRIER, G., SAUMON, D., HUBBARD, W. B., AND LUNINE, J. I. The molecular-metallic transition of hydrogen and the structure of Jupiter and Saturn. *The Astrophysical Journal* 391 (1992), 817.
- [58] CHARBONNEAU, D., BERTA, Z. K., IRWIN, J., BURKE, C. J., NUTZMAN, P., BUCHHAVE, L. A., LOVIS, C., BONFILS, X., LATHAM, D., UDRY, S., MURRAY-CLAY, R. A., HOLMAN, M. J., FALCO, E. E., WINN, J. N., QUELOZ, D., PEPE, F., MAYOR, M., DELFOSSE, X., AND FORVEILLE, T. A super-Earth transiting a nearby low-mass star. *Nature* 462 (2009), 891.
- [59] CHENTSOV, A., AND LEVASHOV, P. Isentropic Compression of Deuterium by Quantum Molecular Dynamics. *Contrib. Plasma Phys.* 52 (2012), 33.
- [60] CHIHARA, J. Difference in X-ray scattering between metallic and non-metallic liquids due to conduction electrons. *J. Phys. F* 17 (1987), 295.
- [61] CHIHARA, J. Interaction of photons with plasmas and liquid metals - photoabsorption and scattering. *J. Phys. Cond. Matter* 12 (2000), 231.
- [62] CRAWFORD, R. K., AND DANIELS, W. B. Experimental Determination of the P-T Melting Curves of Kr, Ne, and He. *J. Chem. Phys.* 55 (1971), 5651.
- [63] CROSSFIELD, I. J. M., BILLER, B., SCHLIEDER, J. E., DEACON, N. R., BONNEFOY, M., HOMEIER, D., ALLARD, F., BUENZLI, E., HENNING, T., BRANDNER, W., GOLDMAN, B., AND KOPYTOVA, T. A global cloud map of the nearest known brown dwarf. *Nature* 505 (2014), 654.

- [64] DA SILVA, L., CELLIERS, P., COLLINS, G., BUDIL, K., HOLMES, N., BARBEE JR., T., HAMMEL, B., KILKENNY, J., WALLACE, R., ROSS, M., CAUBLE, R., NG, A., AND CHIU, G. Absolute Equation of State Measurements on Shocked Liquid Deuterium up to 200 GPa (2 Mbar). *Phys. Rev. Lett.* *78* (Jan 1997), 483.
- [65] DATCHI, F., LOUBEYRE, P., AND LE TOULLEC, R. Extended and accurate determination of the melting curves of argon, helium, ice (H₂O), and hydrogen (H₂). *Phys. Rev. B* *61* (2000), 6535.
- [66] DAVIS, P., DÖPPNER, T., RYGG, J., FORTMANN, C., DIVOL, L., PAK, A., FLETCHER, L., HOLST, B., BECKER, A., SPERLING, P., REDMER, R., DESJARLAIS, M., CELLIERS, P., COLLINS, G., LANDEN, O., FALCONE, R. W., AND GLENZER, S. Dissociation-induced metallization of dynamically compressed deuterium. *Nature Geoscience* (2014), eingereicht.
- [67] DEEMYAD, S., AND SILVERA, I. F. Melting Line of Hydrogen at High Pressures. *Phys. Rev. Lett.* *100*, 15 (2008), 155701.
- [68] DELEUIL, M., DEEG, H. J., ALONSO, R., BOUCHY, F., ROUAN, D., AUVERGNE, M., BAGLIN, A., AIGRAIN, S., ALMENARA, J. M., BARBIERI, M., BARGE, P., BRUNTT, H., BORDÉ, P., COLLIER CAMERON, A., CSIZMADIA, SZ., DE LA REZA, R., DVORAK, R., ERIKSON, A., FRIDLUND, M., GANDOLFI, D., GILLON, M., GUENTHER, E., GUILLOT, T., HATZES, A., HÉBRARD, G., JORDA, L., LAMMER, H., LÉGER, A., LLEBARIA, A., LOEILLET, B., MAYOR, M., MAZEH, T., MOUTOU, C., OLLIVIER, M., PÄTZOLD, M., PONT, F., QUELOZ, D., RAUER, H., SCHNEIDER, J., SHPORER, A., WUCHTERL, G., AND ZUCKER, S. Transiting exoplanets from the CoRoT space mission - VI. CoRoT-Exo-3b: the first secure inhabitant of the brown-dwarf desert. *A&A* *491* (2008), 889.
- [69] DESJARLAIS, M. P. Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing. *Phys. Rev. B* *68* (2003), 064204.
- [70] DESJARLAIS, M. P. First-principles calculation of entropy for liquid metals. *Phys. Rev. E* *88* (2013), 062145.

- [71] DEWITT, H., SLATTERY, W., AND CHABRIER, G. Numerical simulation of strongly coupled binary ionic plasmas. *Physica B* 228 (1996), 158.
- [72] DIATSCHENKO, V., CHU, C. W., LIEBENBERG, D. H., YOUNG, D. A., ROSS, M., AND MILLS, R. L. Melting curves of molecular hydrogen and molecular deuterium under high pressures between 20 and 373 K. *Phys. Rev. B* 32 (1985), 381.
- [73] DION, M., RYDBERG, H., SCHRÖDER, E., LANGRETH, D. C., AND LUNDQVIST, B. I. Van der Waals Density Functional for General Geometries. *Phys. Rev. Lett.* 92 (Jun 2004), 246401.
- [74] DISTASIO, R., GOBRE, V., AND TKATCHENKO, A. Many-body van der Waals interactions in molecules and condensed matter. *Journal of Physics: Condensed Matter* 26 (2014), 213202.
- [75] DUBROVINSKY, L., DUBROVINSKAIA, N., PRAKAPENKA, V., AND ABAKUMOV, A. Implementation of micro-ball nanodiamond anvils for high-pressure studies above 6 Mbar. *Nature Communications* 3 (2012), 1163.
- [76] DUVALL, G. E., AND GRAHAM, R. A. Phase transitions under shock-wave loading. *Rev. Mod. Phys* 49 (1977), 523.
- [77] DZYABURA, V., ZAGHOO, M., AND SILVERA, I. F. Evidence of a liquid–liquid phase transition in hot dense hydrogen. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 110 (2013), 8040.
- [78] DÍAZ, R. F., DAMIANI, C., DELEUIL, M., ALMENARA, J. M., MOUTOU, C., BARROS, S. C. C., BONOMO, A. S., BOUCHY, F., BRUNO, G., HÉBRARD, G., MONTAGNIER, G., AND SANTERNE, A. SOPHIE velocimetry of Kepler transit candidates - VIII. KOI-205 b: a brown-dwarf companion to a K-type dwarf. *A&A* 551 (2013), L9.
- [79] D'ANTONA, F. & MAZZITELLI, I. Evolution of low mass stars. *Mem. Soc. Astron. It.* 68 (1997), 807.
- [80] EBELING, W. Coulomb interaction and ionization equilibrium in partially ionized plasmas. *Physica* 43 (1969), 293.

- [81] EBELING, W., AND RICHERT, W. Plasma phase-transition in hydrogen. *Phys. Lett. A* 108 (1985), 80.
- [82] EBELING, W., AND RICHERT, W. Thermodynamic properties of liquid hydrogen metal. *Phys. Stat. Sol. B* 128 (1985), 467.
- [83] EGGERT, J., BRYGOO, S., LOUBEYRE, P., MCWILLIAMS, R. S., CELLIERS, P. M., HICKS, D. G., BOEHLY, T. R., JEANLOZ, R., AND COLLINS, G. W. Hugoniot Data for Helium in the Ionization Regime. *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008), 124503.
- [84] ENGEL, E., AND DREIZLER, R. M. *Density Functional Theory: An Advanced Course*. Springer, 2011.
- [85] EREMETS, M. I., AND TROJAN, I. A. Evidence of maximum in the melting curve of hydrogen at megabar pressures. *JETP Letters* 89 (2009), 174.
- [86] EREMETS, M. I., AND TROYAN, I. A. Conductive dense hydrogen. *Nat. Mater.* 10 (2011), 927.
- [87] FAIK, S., BASKO, M. M., TAUSCHWITZ, A., IOSILEVSKIY, I., AND MARUHN, J. A. Dynamics of volumetrically heated matter passing through the liquid-vapor metastable states. *High Energy Density Physics* 8 (2012), 349.
- [88] FERMI, E. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Zeitschrift für Physik* 48 (1928), 73.
- [89] FEYNMAN, R., METROPOLIS, N., AND TELLER, E. Equations of state of elements based on the generalized Thomas-Fermi theory. *Phys. Rev.* 75 (1949), 1561.
- [90] FÖRSTER, A., KAHLBAUM, T., AND EBELING, W. Equation of state and the phase diagram of dense fluid helium in the region of partial ionization. *Laser Part. Beams* 10 (1992), 253.
- [91] FORTNEY, J. J. Looking into the Giant Planets. *Science* 305 (2004), 1414.

- [92] FORTNEY, J. J., AND HUBBARD, W. B. Phase separation in giant planets: inhomogeneous evolution of Saturn. *Icarus* 164 (2003), 228.
- [93] FORTNEY, J. J., MARLEY, M. S., AND BARNES, J. W. Planetary radii across five orders of magnitude in mass and stellar insolation: application to transits. *The Astrophysical Journal* 659 (2007), 1661.
- [94] FORTNEY, J. J., MARLEY, M. S., SAUMON, D., AND LODDERS, K. Synthetic Spectra and Colors of Young Giant Planet Atmospheres: Effects of Initial Conditions and Atmospheric Metallicity. *The Astrophysical Journal* 683 (2008), 1104.
- [95] FORTOV, V. E. *Extreme states of matter on Earth and in the Cosmos*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [96] FORTOV, V. E., ILKAEV, R. I., ARININ, V. A., BURTZEV, V. V., GOLUBEV, V. A., IOSILEVSKIY, I. L., KHRUSTALEV, V. V., MIKHAILOV, A. L., MOCHALOV, M. A., TERNOVOI, V. Y., AND ZHERNOKLETOV, M. V. Phase Transition in a Strongly Nonideal Deuterium Plasma Generated by Quasi-Isentropical Compression at Megabar Pressures. *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007), 185001.
- [97] FORTOV, V. E., TERNOVOI, V. Y., ZHERNOKLETOV, M. V., MOCHALOV, M. A., MIKHAILOV, A. L., FILIMONOV, A. S., PYALLING, A. A., MINTSEV, V. B., GRYAZNOV, V. K., AND IOSILEVSKII, I. L. Pressure-produced ionization of nonideal plasma in a megabar range of dynamic pressures. *J. Exp. Theor. Phys.* 97 (2003), 259.
- [98] FRENCH, M. *Thermodynamische und Transporteigenschaften von Wasser bei hohen Drücken und hohen Temperaturen*. Dissertation, Universität Rostock, 2010.
- [99] FRENCH, M., BECKER, A., LORENZEN, W., NETTELMANN, N., BETHKENHAGEN, M., WICHT, J., AND REDMER, R. *Ab initio* simulations for the material properties along jupiter's adiabat. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 202 (2012), 5.

- [100] FRENCH, M., HAMEL, S., AND REDMER, R. Dynamical Screening and Ionic Conductivity in Water from *Ab Initio* Simulations. *Phys. Rev. Lett.* *107* (2011), 185901.
- [101] FRENCH, M., MATTSSON, T. R., NETTELMANN, N., AND REDMER, R. Equation of state and phase diagram of water at ultrahigh pressures as in planetary interiors. *Phys. Rev. B* *79* (2009), 054107.
- [102] FRENCH, M., AND REDMER, R. Optical properties of water at high temperature. *Phys. Plasmas* *18* (2011), 043301.
- [103] GASTINE, T., WICHT, J., DUARTE, L. D. V., HEIMPEL, M., AND BECKER, A. Explaining Jupiter's magnetic field and equatorial jet dynamics. *Geophysical Research Letters* *41* (2014), 5410.
- [104] GLENZER, S. H., AND REDMER, R. X-ray Thomson scattering in high energy density plasmas. *Rev. Mod. Phys.* *81* (2009), 1625.
- [105] GLENZER, S. H., ROZMUS, W., MACGOWAN, B. J., ESTABROOK, K. G., DE GROOT, J. D., ZIMMERMAN, G. B., BALDIS, H. A., HARTE, J. A., LEE, R. W., WILLIAMS, E. A., AND WILSON, B. G. Thomson Scattering from High- Z Laser-Produced Plasmas. *Phys. Rev. Lett.* *82* (1999), 97.
- [106] GÓMEZ-PÉREZ, N., HEIMPEL, M., AND WICHT, J. Effects of radially varying electrical conductivity on 3D numerical dynamos. *Phys. Earth Planet. Inter.* *181* (2010), 42.
- [107] GONCHAROV, A., HOWIE, R., AND GREGORYANZ, E. Hydrogen at extreme pressures (Review Article). *Low Temperature Physics* *39* (2013), 402.
- [108] GONZE, X., AMADON, B., ANGLADE, P.-M., BEUKEN, J.-M., BOTTIN, F., BOULANGER, P., BRUNÉVAL, F., CALISTE, D., CARACAS, R., CÔTÉ, M., DEUTSCH, T., GENOVESE, L., GHOSEZ, P., GIANTOMASSI, M., GOEDECKER, S., HAMANN, D., HERMET, P., JOLLET, F., JOMARD, G., LEROUX, S., MANCINI, M., MAZEVET, S., OLIVEIRA, M., ONIDA, G., POUILLON, Y., RANGEL, T., RIGNANESE, G.-M., SANGALLI, D.,

- SHALTAF, R., TORRENT, M., VERSTRAETE, M., ZERAH, G., AND ZWANZIGER, J. ABINIT: First-principles approach to material and nanosystem properties. *Comput. Phys. Commun.* 180 (2009), 2582.
- [109] GRABOSKE, JR., H., POLLACK, J., GROSSMANN, A., AND OLNES, R. The structure and evolution of Jupiter – the fluid contraction stage. *The Astrophysical Journal* 199 (1975), 265.
- [110] GRABOSKE, JR., H. C., HARWOOD, D. J., AND ROGERS, F. J. Thermodynamic Properties of Nonideal Gases. I. Free-Energy Minimization Method. *Phys. Rev.* 186 (1969), 210.
- [111] GREENE, R. G., LUO, H., AND RUOFF, A. L. Al as a Simple Solid: High Pressure Study to 220 GPa (2.2 Mbar). *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), 2075.
- [112] GREENWOOD, D. A. The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals. *Proc. Phys. Soc.* 71 (1958), 585.
- [113] GREGORYANZ, E., GONCHAROV, A. F., MATSUISHI, K., MAO, H.-K., AND HEMLEY, R. J. Raman Spectroscopy of Hot Dense Hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), 175701.
- [114] GRIGOREV, F. V., TOLOCHKO, A., URLIN, V., KORMER, S., AND MIKHAILO, O. Experimental determination of compressibility of hydrogen at densities 0.5-2 g/ccm - metallization of hydrogen. *JETP Letters-USSR* 16 (1972), 201.
- [115] GUDKOVA, T., AND ZHARKOV, V. Models of Jupiter and Saturn after Galileo mission. *Planet. Space Sci.* 47 (1999), 1201.
- [116] GUILLOT, T. A comparison of the interiors of Jupiter and Saturn. *Planet. Space Sci.* 47 (1999), 1183.
- [117] GUILLOT, T. Interiors of giant planets inside and outside the solar system. *Science* 286 (1999), 72.
- [118] GUILLOT, T. The Interior of Giant Planets: Models and Outstanding Questions. *Ann. Rev. Earth & Plan. Sciences* 33 (2005), 493.

- [119] GUILLOT, T., CHABRIER, G., GAUTIER, D., AND MOREL, P. Effect of radiative transport on the evolution of Jupiter and Saturn. *The Astrophysical Journal* 450 (1995), 463.
- [120] HAAS, P., TRAN, F., AND BLAHA, P. Calculation of the lattice constant of solids with semilocal functionals. *Phys. Rev. B* 79 (2009), 085104.
- [121] HAAS, P., TRAN, F., BLAHA, P., PEDROZA, L. S., DA SILVA, A. J. R., ODASHIMA, M. M., AND CAPELLE, K. Systematic investigation of a family of gradient-dependent functionals for solids. *Phys. Rev. B* 81 (2010), 125136.
- [122] HAMANN, D. R. H₂O hydrogen bonding in density-functional theory. *Phys. Rev. B* 55 (1997), R10157.
- [123] HAYASHI, C., AND NAKANO, T. Evolution of Stars of Small Masses in the Pre-Main-Sequence Stages. *Progress of Theoretical Physics* 30 (1963), 460.
- [124] HÉBRARD, G., ALMENARA, J.-M., SANTERNE, A., DELEUIL, M., DAMIANI, C., BONOMO, A. S., BOUCHY, F., BRUNO, G., DÍAZ, R. F., MONTAGNIER, G., AND MOUTOU, C. KOI-200b and KOI-889b: Two transiting exoplanets detected and characterized with Kepler, SOPHIE, and HARPS-N. *A&A* 554 (2013), A114.
- [125] HELLMANN, R., BICH, E., AND VOGEL, E. Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of dilute helium gas. I. Helium-helium interatomic potential. *Mol. Phys.* 105 (2007), 3013.
- [126] HENDERSON, T. M., PAIER, J., AND SCUSERIA, G. E. Accurate treatment of solids with the HSE screened hybrid. *Phys. Stat. Sol. B* 248 (2011), 767.
- [127] HENNEBELLE, P., AND CHABRIER, G. Analytical theory for the initial mass function: CO clumps and prestellar core. *The Astrophysical Journal* 684 (2008), 395.
- [128] HEYD, J., PERALTA, J. E., SCUSERIA, G. E., AND MARTIN, R. L. Energy band gaps and lattice parameters evaluated with the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened hybrid functional. *J. Chem. Phys.* 123 (2005), 174101.

- [129] HEYD, J., AND SCUSERIA, G. E. Assessment and validation of a screened Coulomb hybrid density functional. *J. Chem. Phys.* 120 (2004), 7274.
- [130] HEYD, J., AND SCUSERIA, G. E. Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional. *J. Chem. Phys.* 121 (2004), 1187.
- [131] HEYD, J., SCUSERIA, G. E., AND ERNZERHOF, M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *J. Chem. Phys.* 118 (2003), 8207.
- [132] HEYD, J., SCUSERIA, G. E., AND ERNZERHOF, M. Erratum: “Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential” [J. Chem. Phys. [bold 118], 8207 (2003)]. *J. Chem. Phys.* 124 (2006), 219906.
- [133] HICKS, D. G., BOEHLY, T. R., CELLIERS, P. M., EGGERT, J. H., MOON, S. J., MEYERHOFER, D. D., AND COLLINS, G. W. Laser-driven single shock compression of fluid deuterium from 45 to 220 GPa. *Phys. Rev. B* 79, 1 (2009), 014112.
- [134] HILLENBRAND, L. A. On the stellar population and star-forming history of the Orion Nebula Cluster. *Astron. J.* 113 (1997), 1733.
- [135] HOHENBERG, P., AND KOHN, W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 136 (1964), B864.
- [136] HOLMES, N., ROSS, M., AND NELLIS, W. Temperature measurements and dissociation of shock-compressed liquid deuterium and hydrogen. *Phys. Rev. B* 52 (1995), 15835.
- [137] HOLST, B. *Ab-initio-Simulationen für die Zustandsgleichung und Transportgrößen von dichtem Wasserstoff*. PhD thesis, University of Rostock, 2011.
- [138] HOLST, B., FRENCH, M., AND REDMER, R. Electronic transport coefficients from ab initio simulations and application to dense liquid hydrogen. *Phys. Rev. B* 83 (2011), 235120.

- [139] HOLST, B., NETTELMANN, N., AND REDMER, R. Equation of state for dense hydrogen and plasma phase transition. *Contrib. Plasma Phys.* 47 (2007), 368.
- [140] HOLST, B., REDMER, R., AND DESJARLAIS, M. P. Thermophysical properties of warm dense hydrogen using quantum molecular dynamics simulations. *Phys. Rev. B* 77 (2008), 184201.
- [141] HOWIE, R., GUILLAUME, C., SCHELER, T., GONCHAROV, A., AND GREGORYANZ, E. Mixed Molecular and Atomic Phase of Dense Hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012), 125501.
- [142] HU, S. X., MILITZER, B., GONCHAROV, V. N., AND SKUPSKY, S. First-principles equation-of-state table of deuterium for inertial confinement fusion applications. *Phys. Rev. B* 84 (2011), 224109.
- [143] HUBBARD, W. Studies in stellar evolution .V. Transport coefficients of degenerate stellar matter. *The Astrophysical Journal* 146 (1966), 858.
- [144] HUBBARD, W. Structure of Jupiter: Chemical composition, contraction, and rotation. *The Astrophysical Journal* 162 (1970), 687.
- [145] HUBBARD, W. The Jovian Surface Condition and Cooling Rate. *Icarus* 30 (1977), 305.
- [146] HUBBARD, W. B., AND MARLEY, M. S. Optimized Jupiter, Saturn, and Uranus interior models. *Icarus* 78 (1989), 102.
- [147] HUBER, K., AND HERZBERG, G. *Molecular Spectra and Molecular Structure*. Van Nostrand, New York, 1979.
- [148] HUMMER, D. G., AND MIHALAS, D. The equation of state for stellar envelopes. I - an occupation probability formalism for the truncation of internal partition functions. *The Astrophysical Journal* 331 (Aug. 1988), 794.
- [149] HUMMER, K., HARL, J., AND KRESSE, G. Heyd-Scuseria-Ernzerhof hybrid functional for calculating the lattice dynamics of semiconductors. *Phys. Rev. B* 80 (2009), 115205.

- [150] HURRICANE, O. A., CALLAHAN, D. A., CASEY, D. T., CELLIERS, P. M., CERJAN, C., DEWALD, E. L., DITTRICH, T. R., DÖPPNER, T., HINKEL, D. E., HOPKINS, L. F. B., KLINE, J. L., PAPE, S. L., MA, T., MACPHEE, A. G., MILOVICH, J. L., PAK, A., PARK, H.-S., PATEL, P. K., REMINGTON, B. A., SALMONSON, J. D., SPRINGER, P. T., AND TOMMASINI, R. Fuel gain exceeding unity in an inertially confined fusion implosion. *Nature* 506 (2014), 343.
- [151] HÖLL, A., BORNATH, T., CAO, L., DÖPPNER, T., DÜSTERER, S., FÖRSTER, E., FORTMANN, C., GLENZER, S., GREGORI, G., LAARMANN, T., MEIWES-BROER, K.-H., PRYZSTAWIK, A., RADCLIFFE, P., REDMER, R., REINHOLZ, H., RÖPKE, G., THIELE, R., TIGGESBÄUMKER, J., TOLEIKIS, S., TRUONG, N., TSCHENTSCHER, T., USCHMANN, I., AND ZASTRAU, U. Thomson scattering from near-solid density plasmas using soft X-ray free electron lasers . *High Energy Density Physics* 3 (2007), 120.
- [152] ICHIMARU, S., IYETOMI, H., AND TANAKA, S. Statistical physics of dense plasmas: Thermodynamics, transport coefficients and dynamic correlations. *Phys. Rep.* 149 (1987), 91.
- [153] IGLESIAS, C. A., AND ROGERS, F. J. Discrepancies between opal and OP opacities at high densities and temperatures. *The Astrophysical Journal* 443 (1995), 460.
- [154] IGLESIAS, C. A., AND ROGERS, F. J. Updated Opal Opacities. *The Astrophysical Journal* 464 (1996), 943.
- [155] JOHNSON, J. A., APPS, K., GAZAK, J. Z., CREPP, J. R., CROSSFIELD, I. J., HOWARD, A. W., MARCY, G. W., MORTON, T. D., CHUBAK, C., AND ISAACSON, H. LHS 6343 C: A Transiting Field Brown Dwarf Discovered by the Kepler Mission. *The Astrophysical Journal* 730 (2011), 79.
- [156] JONES, C. A dynamo model of Jupiter's magnetic field. *Icarus* 241 (2014), 148.

- [157] JONES, R. O., AND GUNNARSSON, O. The density functional formalism, its applications and prospects. *Rev. Mod. Phys.* 61 (1989), 689.
- [158] JURANEK, H., REDMER, R., AND ROSENFELD, Y. Fluid variational theory for pressure dissociation in dense hydrogen: Multicomponent reference system and nonadditivity effects. *J. Chem. Phys.* 117 (2002), 1768.
- [159] KARASIEV, V. V., SJOSTROM, T., DUFTY, J., AND TRICKEY, S. B. Accurate Homogeneous Electron Gas Exchange-Correlation Free Energy for Local Spin-Density Calculations. *Phys. Rev. Lett.* 112 (Feb 2014), 076403.
- [160] KEMP, A., AND TER VEHN, J. M. An equation of state code for hot dense matter, based on the QEOS description. *Nucl. Instrum. Methods A* 415 (1998), 674.
- [161] KEMP, A., AND TER VEHN, J. M. Das Zustandsgleichungs-Modell QEOS für heisse, dichte Materie. Technical report 229, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, 1998.
- [162] KIETZMANN, A. *Quanten-Molekulardynamik-Simulationen dichter Fluide*. PhD thesis, Universität Rostock, 2008.
- [163] KIPPENHAHN, R., AND WEIGERT, A. *Stellar Structure and Evolution*. Springer, Berlin, 1991.
- [164] KIRKPATRICK, J. D., REID, I. N., LIEBERT, J., CUTRI, R. M., NELSON, B., BEICHMAN, C. A., DAHN, C. C., MONET, D. G., GIZIS, J. E., AND SKRUTSKIE, M. F. Dwarfs Cooler than M': The Definition of Spectral Type L Using Discoveries from the 2-Micron All-Sky Survey (2MASS). *The Astrophysical Journal* 519 (1999), 802.
- [165] KIRKWOOD, J. Statistical mechanics of fluid mixtures. *J. Chem. Phys.* 3 (1935), 300.
- [166] KNUDSON, M. D., AND DESJARLAIS, M. P. Shock Compression of Quartz to 1.6 TPa: Redefining a Pressure Standard. *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009), 225501.

- [167] KNUDSON, M. D., DESJARLAIS, M. P., BECKER, A., LEMKE, R. W., COCHRANE, K. R., SAVAGE, M. E., BLISS, D. E., MATTSSON, T. R., AND REDMER, R. Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid hydrogen. *Science* 348 (2015), 1455.
- [168] KNUDSON, M. D., DESJARLAIS, M. P., LEMKE, R. W., MATTSSON, T. R., FRENCH, M., NETTELMANN, N., AND REDMER, R. Probing the Interiors of the Ice Giants: Shock Compression of Water to 700 GPa and 3.8 g/cm³. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012), 091102.
- [169] KNUDSON, M. D., HANSON, D. L., BAILEY, J. E., HALL, C. A., ASAY, J. R., AND DEENEY, C. Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques. *Phys. Rev. B* 69 (2004), 144209.
- [170] KOCH, W., AND HOLTHAUSEN, M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd Edition*. Wiley-VCH, Weinheim, 2001.
- [171] KOHANOFF, J. *Electronic structure calculations for solids and molecules: theory and computational methods*. Condensed matter physics, nanoscience and mesoscopic physics. Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [172] KOHN, W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals. *Rev. Mod. Phys.* 71 (1999), 1253.
- [173] KOHN, W., AND SHAM, L. J. Self-consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 140 (1965), A1133.
- [174] KOPYSHEV, V., AND KHRUSTALEV, V. Equation of state of hydrogen up to 10 Mbar. *J. Appl. Mech. Tech. Phys* 21 (1980), 113.
- [175] KRAMIDA, A., RALCHENKO, Y., READER, J., AND TEAM, N. A. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0), 2012.
- [176] KRESSE, G., AND FURTHMÜLLER, J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B* 54 (1996), 11169.

- [177] KRESSE, G., AND HAFNER, J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Phys. Rev. B* 47 (1993), 558.
- [178] KRESSE, G., AND HAFNER, J. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal–amorphous-semiconductor transition in germanium. *Phys. Rev. B* 49 (1994), 14251.
- [179] KRESSE, G., AND JOUBERT, D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B* 59 (1999), 1758.
- [180] KUBO, R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. *J. Phys. Soc. Jap.* 12 (1957), 570.
- [181] KUMAR, S. S. The structure of stars of very low mass. *The Astrophysical Journal* 137 (1963), 1121.
- [182] KURTH, S., PERDEW, J. P., AND BLAHA, P. Molecular and solid-state tests of density functional approximations: LSD, GGAs, and meta-GGAs. *Int. J. Quantum Chem.* 75 (1999), 889.
- [183] LALLEMAND, M., AND VIDAL, D. Variation of the polarizability of noble gases with density. *J. Chem. Phys.* 66 (1977), 4776.
- [184] LANDAU, L., AND ZELDOVICH, J. On the relation between the liquid and the gaseous states of metals. *Acta Physicochim. URSS* 18 (1943), 194.
- [185] LARKIN, A. I. Thermodynamic Functions Of A Low-Temperature Plasma. *Sov. Phys. JETP* 11 (1960), 6.
- [186] LECONTE, J., AND CHABRIER, G. Layered convection as the origin of Saturn’s luminosity anomaly. *Nature Geoscience* 6 (2013), 347.
- [187] LEE, K., MURRAY, E. D., KONG, L., LUNDQVIST, B. I., AND LANGRETH, D. C. Higher-accuracy van der Waals density functional. *Phys. Rev. B* 82 (2010), 081101.
- [188] LEE, R. W., MOON, S. J., CHUNG, H.-K., ROZMUS, W., BALDIS, H. A., GREGORI, G., CAUBLE, R. C., LANDEN, O. L., WARK, J. S., NG,

- A., AND ROSE, S. J. Finite temperature dense matter studies on next-generation light sources. *J. Opt. Soc. Am. B* 20 (2003), 770.
- [189] LISSAUER, J. Planet formation. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 31 (1993), 129.
- [190] LIU, J., GOLDREICH, P., AND STEVENSON, D. Constraints on deep-seated zonal winds inside Jupiter and Saturn. *Icarus* 196 (2008), 653.
- [191] LODDERS, K. Solar System Abundances and Condensation Temperatures of the Elements. *The Astrophysical Journal* 591 (2003), 1220.
- [192] LORENZ, L. Bestimmung der Wärmegrade in absolutem Maasse. *Ann. Phys.* 223 (1872), 429.
- [193] LORENZEN, W. *Phase Transitions in Hydrogen-Helium Mixtures*. PhD thesis, University of Rostock, 2012.
- [194] LORENZEN, W., BECKER, A., AND REDMER, R. Progress in Warm Dense Matter and Planetary Physics. In *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter*, M. Desjarlais, F. Graziani, R. Redmer, and S. Trickey, Eds. Springer, Berlin, 2014.
- [195] LORENZEN, W., HOLST, B., AND REDMER, R. Demixing of Hydrogen and Helium at Megabar Pressures. *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), 115701.
- [196] LORENZEN, W., HOLST, B., AND REDMER, R. First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen. *Phys. Rev. B* 82 (2010), 195107.
- [197] LORENZEN, W., HOLST, B., AND REDMER, R. Metallization in hydrogen-helium mixtures. *Phys. Rev. B* 84 (2011), 235109.
- [198] LOUBEYRE, P. Three-body exchange interaction in dense helium. *Phys. Rev. Lett.* 58 (1987), 1857.
- [199] LOUBEYRE, P., BESSON, J. M., PINCEAUX, J. P., AND HANSEN, J. P. High-Pressure Melting Curve of ^4He . *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982), 1172.

- [200] LOUBEYRE, P., BRYGOO, S., EGGERT, J., CELLIERS, P. M., SPAULDING, D. K., RYGG, J. R., BOEHLY, T. R., COLLINS, G. W., AND JEANLOZ, R. Extended data set for the equation of state of warm dense hydrogen isotopes. *Phys. Rev. B* 86 (2012), 144115.
- [201] LOUBEYRE, P., LETOULLEC, R., HAUSERMANN, D., HANFLAND, M., HEMLEY, R. J., MAO, H. K., AND FINGER, L. W. X-ray diffraction and equation of state of hydrogen at megabar pressures. *Nature* 383 (1996), 702.
- [202] LOUBEYRE, P., LETOULLEC, R., PINCEAUX, J. P., MAO, H. K., HU, J., AND HEMLEY, R. J. Equation of state and phase diagram of solid ^4He from single-crystal x-ray diffraction over a large P - T domain. *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993), 2272.
- [203] LOUBEYRE, P., OCCELLI, F., AND LE TOULLEC, R. Optical studies of solid hydrogen to 320 GPa and evidence for black hydrogen. *Nature* 416 (2002), 613.
- [204] L.SPITZER, J., AND R.HÄRM. Transport Phenomena in a Completely Ionized Gas. *Phys. Rev.* 89 (1953), 977.
- [205] LUNINE, J. I., HUBBARD, W. B., AND MARLEY, M. S. Evolution and infrared spectra of brown dwarfs. *The Astrophysical Journal* 310 (1986), 238.
- [206] MACFARLANE, J., GOLOVKIN, I., AND WOODRUFF, P. HELIOS-CR – A 1-D radiation-magnetohydrodynamics code with inline atomic kinetics modeling. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 99 (2006), 381.
- [207] MAO, H. K., HEMLEY, R. J., WU, Y., JEPHCOAT, A. P., FINGER, L. W., ZHA, C. S., AND BASSETT, W. A. High-Pressure Phase Diagram and Equation of State of Solid Helium from Single-Crystal X-Ray Diffraction to 23.3 GPa. *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988), 2649.
- [208] MARLEY, M., SAUMON, D., GUILLOT, T., FREEDMAN, R., HUBBARD, W., BURROWS, A., AND LUNINE, J. Atmospheric, evolutionary, and spectral models of the brown dwarf Gliese 229 B. *Science* 272 (1996), 1919.

- [209] MAXTED, P., NAPIWOTZKI, R., DOBBIE, P., AND BURLEIGH, M. R. Survival of a brown dwarf after engulfment by a red giant star. *Nature* 442 (2006), 543.
- [210] MAXTED, P. F. L., ANDERSON, D. R., DOYLE, A. P., GILLON, M., HARRINGTON, J., IRO, N., JEHIN, E., LAFRENIÈRE, D., SMALLEY, B., AND SOUTHWORTH, J. Spitzer 3.6 and 4.5 μm full-orbit light curves of WASP-18. *MNRAS* 428 (2013), 2645.
- [211] MAYER, L., QUINN, T., WADSLEY, J., AND STADEL, J. Formation of Giant Planets by Fragmentation of Protoplanetary Disks. *Science* 298 (2002), 1756.
- [212] MAYOR, M., AND QUELOZ, D. A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *Nature* 378 (1995), 355.
- [213] MAZZOLA, G., YUNOKI, S., AND SORELLA, S. Unexpectedly high pressure for molecular dissociation in liquid hydrogen by electronic simulation. *Nature Communications* 5 (2014), 3487.
- [214] MCMAHON, J. M., MORALES, M. A., PIERLEONI, C., AND CEPERLEY, D. M. The properties of hydrogen and helium under extrem conditions. *Rev. Mod. Phys.* 84 (2012), 1607.
- [215] MERMIN, N. D. Thermal Properties of the Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 137 (1965), A1441.
- [216] MILITZER, B. Path integral Monte Carlo and density functional molecular dynamics simulations of hot, dense helium. *Phys. Rev. B* 79 (2009), 155105.
- [217] MILITZER, B. Equation of state calculations of hydrogen-helium mixtures in solar and extrasolar giant planets. *Phys. Rev. B* 79 (2013), 014202.
- [218] MILITZER, B., AND HUBBARD, W. Ab Initio Equation of State for Hydrogen-Helium Mixtures with Recalibration of the Giant-Planet Mass-Radius Relation. *The Astrophysical Journal* 774 (2013), 148.

- [219] MILITZER, B., HUBBARD, W. B., VORBERGER, J., TAMBLYN, I., AND BONEV, S. A. A Massive Core in Jupiter Predicted from First-Principles Simulations. *The Astrophysical Journal Letters* 688 (2008), L45.
- [220] MILLS, R. L., LIEBENBERG, D. H., AND BRONSON, J. C. Equation of state and melting properties of ^4He from measurements to 20 kbar. *Phys. Rev. B* 21 (1980), 5137.
- [221] MOCHALOV, M., ILKAEV, R., FORTOV, V., MIKHAILOV, A., MAKAROV, Y., ARININ, V., GRISHECHKIN, S., BLIKOV, A., OGORODNIKOV, V., RYZHKOV, A., AND GRYAZNOV, V. Measurement of the compressibility of a deuterium plasma at a pressure of 1800 GPa. *JETP Letters* 92 (2010), 300.
- [222] MOCHALOV, M., IL'KAEV, R., FORTOV, V., MIKHAILOV, A., RAEVSKII, V., OGORODNIKOV, V., YUKHIMCHUK, A., DAVYDOV, A., ANASHKIN, N., ARININ, V., BLIKOV, A., BAURIN, A., DAVYDOV, N., KOMRAKOV, V., LOGVINOV, A., MANACHKIN, S., RYZHKOV, A., TKACHENKO, B., FEDOROV, A., FINYUSHIN, S., KALASHNIKOV, D., CHUDAKOV, E., PRONIN, E., AND BAKULINA, E. Quasi-isentropic compressibility of deuterium and helium at pressures of 1500–5000 GPa. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 119 (2014), 146.
- [223] MOHANTY, S., JAYAWARDHANA, R., HUÉLAMO, N., AND MAMAJEK, E. The Planetary Mass Companion 2MASS 1207–3932B: Temperature, Mass, and Evidence for an Edge-on Disk. *The Astrophysical Journal* 657 (2007), 1064.
- [224] MOLLIÈRE, P., AND MORDASINI, C. Deuterium burning in objects forming via the core accretion scenario. *A&A* 547 (2012), A105.
- [225] MONKHORST, H. J., AND PACK, J. D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B* 13 (1976), 5188.
- [226] MORALES, M. A., BENEDICT, L. X., CLARK, D. S., SCHWEGLER, E., TAMBLYN, I., BONEV, S. A., CORREA, A. A., AND HAAN, S. W. Ab

- initio calculations of the equation of state of hydrogen in a regime relevant for inertial fusion applications. *High Energy Density Phys.* 8 (2012), 5.
- [227] MORALES, M. A., HAMEL, S., CASPERSEN, K., AND SCHWEGLER, E. Hydrogen-helium demixing from first principles: From diamond anvil cells to planetary interiors. *Phys. Rev. B* 87 (2013), 174105.
- [228] MORALES, M. A., MCMAHON, J. M., PIERLEONI, C., AND CEPERLEY, D. M. Nuclear Quantum Effects and Nonlocal Exchange-Correlation Functionals Applied to Liquid Hydrogen at High Pressure. *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), 065702.
- [229] MORALES, M. A., PIERLEONI, C., AND CEPERLEY, D. M. Equation of state of metallic hydrogen from coupled electron-ion Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. E* 81 (2010), 021202.
- [230] MORALES, M. A., PIERLEONI, C., SCHWEGLER, E., AND CEPERLEY, D. M. Evidence for a first-order liquid-liquid transition in high-pressure hydrogen from ab initio simulations. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 107 (2010), 12799.
- [231] MORALES, M. A., SCHWEGLER, E., CEPERLEY, D., PIERLEONI, C., HAMEL, S., AND CASPERSEN, K. Phase separation in hydrogen – helium mixtures at Mbar pressures. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 106 (2009), 1324.
- [232] MORE, R. M., WARREN, K. H., YOUNG, D. A., AND ZIMMERMAN, G. B. A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter. *Physics of Fluids* 31 (1988), 3059.
- [233] MORIARTY, J. A., YOUNG, D. A., AND ROSS, M. Theoretical study of the aluminum melting curve to very high pressure. *Phys. Rev. B* 30 (1984), 578.
- [234] NAKAJIMA, T., OPPENHEIMER, B. R., KULKARNI, S. R., GOLIMOWSKI, D. A., MATTHEWS, K., AND DURRANCE, S. T. Discovery of a cool brown dwarf. *Nature* 378 (1995), 463.

- [235] NELLIS, W. J., HOLMES, N. C., MITCHELL, A. C., TRAINOR, R. J., GOVERNO, G. K., ROSS, M., AND YOUNG, D. A. Shock Compression of Liquid Helium to 56 GPa (560 kbar). *Phys. Rev. Lett.* *53* (1984), 1248.
- [236] NELLIS, W. J., MITCHELL, A. C., MCCANDLESS, P. C., ERSKINE, D. J., AND WEIR, S. T. Electronic energy gap of molecular hydrogen from electrical conductivity measurements at high shock pressures. *Phys. Rev. Lett.* *68* (1992), 2937.
- [237] NELLIS, W. J., MITCHELL, A. C., VAN THIEL, M., DEVINE, G. J., TRAINOR, R. J., AND BROWN, N. Equation-of-state data for molecular hydrogen and deuterium at shock pressures in the range 2-76 GPa (20-760 kbar). *J. Chem. Phys.* *79* (1983), 1480.
- [238] NELLIS, W. J., ROSS, M., AND HOLMES, N. Temperature Measurement of Shock-Compressed Liquid Hydrogen: Implications for the Interior of Jupiter. *Science* *269* (1995), 1249.
- [239] NELLIS, W. J., WEIR, S. T., AND MITCHELL, A. C. Metallization and electrical conductivity of hydrogen in Jupiter. *Science* *273* (1996), 936.
- [240] NELLIS, W. J., WEIR, S. T., AND MITCHELL, A. C. Minimum metallic conductivity of fluid hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar). *Phys. Rev. B* *59* (1999), 3434.
- [241] NETTELMANN, N. *Matter under extreme conditions: modelling giant planets*. Phd thesis, University of Rostock, 2009.
- [242] NETTELMANN, N. Predictions on the core mass of Jupiter and of giant planets in general. *Astrophys. Space Sci.* *336* (2011), 47.
- [243] NETTELMANN, N., BECKER, A., HOLST, B., AND REDMER, R. Jupiter Models with Improved Ab Initio Hydrogen Equation of State (H-REOS.2). *The Astrophysical Journal* *750* (2012), 52.
- [244] NETTELMANN, N., AND FORTNEY, J. Double Diffusive Convection in Jupiter as a result of H/He demixing. *Proc. R. Soc. Lond. A* *447* (2015), 3422.

- [245] NETTELMANN, N., FORTNEY, J., KRAMM, U., AND REDMER, R. Thermal evolution and structure models of the transiting super-Earth GJ 1214b. *The Astrophysical Journal* 733 (2011), 2.
- [246] NETTELMANN, N., HOLST, B., KIETZMANN, A., FRENCH, M., REDMER, R., AND BLASCHKE, D. Ab initio equation of state data for hydrogen, helium, and water and the internal structure of Jupiter. *The Astrophysical Journal* 683 (2008), 1217.
- [247] NETTELMANN, N., PÜSTOW, R., AND REDMER, R. Saturn layered structure and homogeneous evolution models with different EOS. *Icarus* 255 (2013), 548.
- [248] NOSÉ, S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.* 81 (1984), 511.
- [249] OPPENHEIMER, B. R., KULKARNI, S. R., MATTHEWS, K., AND VAN KERKWIJK, M. H. The Spectrum of the Brown Dwarf Gliese 229B. *The Astrophysical Journal* 502 (1998), 932.
- [250] PADOAN, P., AND NORDLUND, A. The Mysterious Origin of Brown Dwarfs. *The Astrophysical Journal* 617 (2004), 559.
- [251] PAIER, J., MARSMAN, M., HUMMER, K., KRESSE, G., GERBER, I. C., AND ÁNGYÁN, J. G. Screened hybrid density functionals applied to solids. *J. Chem. Phys.* 124 (2006), 154709.
- [252] PALLA, F., AND STAHLER, S. W. Star formation in the Orion Nebula Cluster. *The Astrophysical Journal* 525 (1999), 772.
- [253] PERDEW, J. P., BURKE, K., AND ERNZERHOF, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 77 (1996), 3865.
- [254] PERDEW, J. P., AND WANG, Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Phys. Rev. B* 45 (1992), 13244.
- [255] PERDEW, J. P., AND ZUNGER, A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Phys. Rev. B* 23 (1981), 5048.

- [256] PFAFFENZELLER, O., HOHL, D., AND BALLONE, P. Miscibility of Hydrogen and Helium under Astrophysical Conditions. *Phys. Rev. Lett.* *74* (1995), 2599.
- [257] PLAGEMANN, K.-U., SPERLING, P., THIELE, R., DESJARLAIS, M. P., FORTMANN, C., DÖPPNER, T., LEE, H. J., GLENZER, S. H., AND REDMER, R. Dynamic structure factor in warm dense beryllium. *New Journal of Physics* *14* (2012), 055020.
- [258] PLANCK, M. Zur Quantenstatistik des Bohrschen Atommodells. *Annalen der Physik* *75* (1924), 673.
- [259] POLLACK, J., HUBICKYJ, O., BODENHEIMER, P., LISSAUER, J., PODOLAK, M., AND GREENZWEIG, Y. Formation of the giant planets by concurrent accretion of solids and gas. *Icarus* *124* (1996), 62.
- [260] POTEKHIN, A. Y., AND CHABRIER, G. Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas. II. Extension to relativistic densities and to the solid phase. *Phys. Rev. E* *62* (2000), 8554.
- [261] PRZYBYTEK, M., CENCEK, W., KOMASA, J., LACH, G., JEZIORSKI, B., AND SZALEWICZ, K. Relativistic and Quantum Electrodynamics Effects in the Helium Pair Potential. *Phys. Rev. Lett.* *104* (2010), 183003.
- [262] PÜSTOW, R., NETTELMANN, N., LORENZEN, W., AND REDMER, R. Inhomogeneous cooling of Saturn. *Icarus* (2015), eingereicht.
- [263] REBOLO, R., ZAPATERO OSORIO, M. R., AND MARTÍN, E. Discovery of a brown dwarf in the Pleiades star cluster. *Nature* *377* (1995), 129.
- [264] REDMER, R., AND HOLST, B. Metal-Insulator Transition in Dense Hydrogen. In *Metal-to-Nonmetal Transitions. Springer Series in Material Sciences, Vol. 132*, R. Redmer, B. Holst, and F. Hensel, Eds. Springer, Berlin, 2010, pp. 63–84.
- [265] REDMER, R., AND RÖPKE, G. Quantum statistical approach to the equation of state and the critical point of cesium plasma. *Physica A* *130* (1985), 523.

- [266] REE, F. H. *Shock waves in condensed matter 1987*. Elsevier, New York, 1988, ch. Phase changes and chemistry at high pressures and temperatures.
- [267] REINERS, A., AND BASRI, G. Measuring magnetic fields in ultracool stars and brown dwarfs. *The Astrophysical Journal* 644 (2006), 497.
- [268] REINERS, A., AND BASRI, G. The first direct measurement of surface magnetic fields on very low mass stars. *The Astrophysical Journal* 656 (2007), 1121.
- [269] REINERS, A., AND BASRI, G. Chromospheric activity, rotation, and rotational braking in M and L dwarfs. *The Astrophysical Journal* 684 (2008), 1390.
- [270] REINHOLZ, H., REDMER, R., AND NAGEL, S. Thermodynamic and transport properties of dense hydrogen plasma. *Phys. Rev. E* 52 (1995), 5368.
- [271] REINHOLZ, H., RÖPKE, G., ROSMEJ, S., AND REDMER, R. Warm dense matter conductivity including electron-electron collisions. *Phys. Rev. E* (2015), akzeptiert.
- [272] ROGERS, F., AND IGLESIAS, C. Opacity of Stellar Matter. *Space Science Reviews* 85 (1998), 61.
- [273] ROGERS, F. J., AND IGLESIAS, C. A. Astrophysical Opacity. *Science* 263, 5143 (1994), 50.
- [274] ROMÁN-PÉREZ, G., AND SOLER, J. M. Efficient Implementation of a van der Waals Density Functional: Application to Double-Wall Carbon Nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009), 096102.
- [275] RÖPKE, G. Quantum-statistical approach to the electrical conductivity of dense, high-temperature plasmas. *Phys. Rev. A* 38 (1988), 3001.
- [276] RÖPKE, G., AND REDMER, R. Electrical conductivity of nondegenerate, fully ionized plasmas. *Phys. Rev. A* 39 (1989), 907.
- [277] ROSS, M., REE, F. H., AND YOUNG, D. A. The Equation Of State Of Molecular-Hydrogen At Very High-Density. *J. Chem. Phys.* 79 (1983), 1487.

- [278] RÜTER, H. R., AND REDMER, R. *Ab Initio* Simulations for the Ion-Ion Structure Factor of Warm Dense Aluminum. *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014), 145007.
- [279] SAHA, M. N. Ionization in the solar chromosphere. *Philosophical Magazine Series 6* 40 (1920), 472.
- [280] SALPETER, E. E. Electron density fluctuations in a plasma. *Phys. Rev.* 120 (1960), 1528.
- [281] SANO, T., OZAKI, N., SAKAIYA, T., SHIGEMORI, K., IKOMA, M., KIMURA, T., MIYANISHI, K., ENDO, T., SHIROSHITA, A., TAKAHASHI, H., JITSUI, T., HORI, Y., HIRONAKA, Y., IWAMOTO, A., KADONO, T., NAKAI, M., OKUCHI, T., OTANI, K., SHIMIZU, K., KONDO, T., KODAMA, R., AND MIMA, K. Laser-shock compression and Hugoniot measurements of liquid hydrogen to 55 GPa. *Phys. Rev. B* 83 (2011), 054117.
- [282] SANTAMARÍA-PÉREZ, D., MUKHERJEE, G. D., SCHWAGER, B., AND BOEHLER, R. High-pressure melting curve of helium and neon: Deviations from corresponding states theory. *Phys. Rev. B* 81 (2010), 214101.
- [283] SAUMON, D., AND CHABRIER, G. Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization. *Phys. Rev. A* 46 (1992), 2084.
- [284] SAUMON, D., CHABRIER, G., AND VAN HORN, H. M. An Equation of State for Low-Mass Stars and Giant Planets. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 99 (1995), 713.
- [285] SAUMON, D., GEBALLE, T. R., LEGGETT, S. K., MARLEY, M. S., FREEDMAN, R. S., LODDERS, K., B. FEGLEY, J., AND SENGUPTA, S. K. Molecular Abundances in the Atmosphere of the T Dwarf Gl 229B. *The Astrophysical Journal* 541 (2000), 374.
- [286] SAUMON, D., AND GUILLOT, T. Shock Compression of Deuterium and the Interiors of Jupiter and Saturn. *The Astrophysical Journal* 609 (2004), 1170.

- [287] SCHIAVON, R. P., BARBUY, B., AND SINGH, P. D. The FeH Wing-Ford Band in Spectra of M Stars. *The Astrophysical Journal* 484 (1997), 499.
- [288] SEAGER, S. *Exoplanets*. The University of Arizona space science series. Univ. of Arizona Press, 2010.
- [289] SEAGER, S., KUCHNER, M., HIER-MAJUMDER, C. A., AND MILITZER, B. Mass-Radius Relationships for Solid Exoplanets. *The Astrophysical Journal* 669 (2007), 1279.
- [290] SHAUL, K. R. S., SCHULTZ, A. J., AND KOFKE, D. A. Path-integral Mayer-sampling calculations of the quantum Boltzmann contribution to virial coefficients of helium-4. *Journal of Chemical Physics* 137 (2012), 184101.
- [291] SHAUL, K. R. S., SCHULTZ, A. J., KOFKE, D. A., AND MOLDOVER, M. Semiclassical fifth virial coefficients for improved ab initio helium-4 standards. *Chem. Phys. Lett.* 531 (2012), 11.
- [292] SHOWMAN, A. P., AND KASPI, Y. Atmospheric Dynamics of Brown Dwarfs and Directly Imaged Giant Planets. *The Astrophysical Journal* 776 (2013), 85.
- [293] SJOSTROM, T. Gradient Corrections to the Exchange-Correlation Free Energy. *Poster auf der Konferenz Strongly Coupled Coulomb Systems, Santa Fe* (2014).
- [294] SLAMAN, M. J., AND AZIZ, R. A. Accurate transport-properties and 2nd virial-coefficients for helium bases on a state-of-the-art interatomic potential. *International Journal of Thermophysics* 12 (1991), 837.
- [295] SÖDERLIND, P., AND GONIS, A. Assessing a solids-biased density-gradient functional for actinide metals. *Phys. Rev. B* 82 (2010), 033102.
- [296] SPERLING, P. *Wechselwirkung intensiver Laserpulse mit dichten Plasmen – Ultrakurzzeitkinetik und Diagnostik*. PhD thesis, Universität Rostock, 2013.
- [297] STAROVEROV, V. N., SCUSERIA, G. E., TAO, J., AND PERDEW, J. P. Comparative assessment of a new nonempirical density functional: Molecules and hydrogen-bonded complexes. *J. Chem. Phys.* 119 (2003), 12129.

- [298] STASSUN, K. G., MATHIEU, R. D., AND VALENTI, J. A. Discovery of two young brown dwarfs in an eclipsing binary system. *Nature* 440 (2006), 311.
- [299] STEPHENS, D. C., LEGGETT, S. K., CUSHING, M. C., MARLEY, M. S., SAUMON, D., GEBALLE, T. R., GOLIMOWSKI, D. A., FAN, X., AND NOLL, K. S. The 0.8-14.5 μm Spectra of Mid-L to Mid-T Dwarfs: Diagnostics of Effective Temperature, Grain Sedimentation, Gas Transport, and Surface Gravity. *The Astrophysical Journal* 702 (2009), 154.
- [300] STEVENSON, D. J. The search for Brown Dwarfs. *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 29 (1991), 163.
- [301] STEVENSON, D. J., AND SALPETER, E. E. The dynamics and helium distribution in hydrogen-helium fluid planets. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 35 (1977), 239.
- [302] STEVENSON, D. J., AND SALPETER, E. E. The phase diagram and transport properties for hydrogen-helium fluid planets. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 35 (1977), 221.
- [303] STIXRUDE, L., AND JEANLOZ, R. Fluid helium at conditions of giant planetary interiors. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 32 (2008), 11071.
- [304] SUBRAMANIAN, N., GONCHAROV, A. F., STRUZHKIN, V. V., SOMAYAZULU, M., AND HEMLEY, R. J. Bonding changes in hot fluid hydrogen at megabar pressures. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 108 (2011), 6014.
- [305] SUGINO, O., AND CAR, R. *Ab Initio* Molecular Dynamics Study of First-Order Phase Transitions: Melting of Silicon. *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995), 1823.
- [306] SWIFT, D. C., EGGERT, J. H., HICKS, D. G., HAMEL, S., CASPERSEN, K., SCHWEGLER, E., COLLINS, G. W., NETTELMANN, N., AND ACKLAND, G. J. Mass-Radius Relationships for Exoplanets. *The Astrophysical Journal* 744 (2012), 59.

- [307] TAMBLYN, I., AND BONEV, S. A. Structure and Phase Boundaries in Compressed Liquid Hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010), 065702.
- [308] THIELE, R. *Thomsonstreuung in warmer und dichter Materie*. PhD thesis, Universität Rostock, 2007.
- [309] THIESEN, M. Untersuchungen über die Zustandsgleichung. *Ann. Phys. (Leipzig)* 24 (1885), 467.
- [310] THOMAS, L. H. The calculation of atomic fields. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 23 (1927), 542.
- [311] THONHAUSER, T., COOPER, V. R., LI, S., PUZDER, A., HYLDGAARD, P., AND LANGRETH, D. C. Van der Waals density functional: Self-consistent potential and the nature of the van der Waals bond. *Phys. Rev. B* 76 (Sep 2007), 125112.
- [312] TKACHENKO, A. *Persönliche Mitteilung* (2015).
- [313] TODOROV, K., LUHMAN, K. L., AND MCLEOD, K. K. Discovery of a Planetary-mass Companion to a Brown Dwarf in Taurus. *The Astrophysical Journal Letters* 714 (2010), L84.
- [314] TONKS, L., AND LANGMUIR, I. Oscillations in Ionized Gases. *Phys. Rev.* 33 (1929), 195.
- [315] VON ZAHN, U., HUNTEN, D. M., AND LEHMACHER, G. Helium in Jupiter's atmosphere: Results from the Galileo probe Helium Interferometer Experiment. *J. Geophys. Res.* 103 (1998), 0148.
- [316] VOS, W. L., VAN HINSBERG, M. G. E., AND SCHOUTEN, J. A. High-pressure triple point in helium: The melting line of helium up to 240 kbar. *Phys. Rev. B* 42 (1990), 6106.
- [317] WANG, C., AND ZHANG, P. Wide range equation of state for fluid hydrogen from density functional theory. *Phys. Plasmas* 20 (2013), 092703.

- [318] WEEKS, J. D., CHANDLER, D., AND ANDERSEN, H. C. Perturbation Theory of the Thermodynamic Properties of Simple Liquids. *Journal of Chemical Physics* 55 (1971), 5422.
- [319] WEEKS, J. D., CHANDLER, D., AND ANDERSEN, H. C. Role of Repulsive Forces in Determining the Equilibrium Structure of Simple Liquids. *Journal of Chemical Physics* 54 (1971), 5237.
- [320] WEIR, S. T., MITCHELL, A. C., AND NELLIS, W. J. Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar). *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996), 1860.
- [321] WHITLEY, H. D., DESJARLAIS, M. P., SCULLARD, C., BENEDICT, L., CASTOR, J., MURILLO, M. S., AND GRAZIANI, F. Electronic transport properties of dense plasma. *Poster auf der Konferenz Strongly Coupled Coulomb Systems, Santa Fe* (2014).
- [322] WICHT, J., AND TILGNER, A. Theory and Modeling of Planetary Dynamics. *Space Sci. Rev.* 152 (2010), 501.
- [323] WIEDEMANN, G., AND FRANZ, R. Über die Wärme-Leitungsfähigkeit der Metalle. *Ann. Phys.* 165 (1853), 497.
- [324] WIGNER, E., AND HUNTINGTON, H. B. On the possibility of a metallic modification of hydrogen. *J. Chem. Phys.* 3 (1935), 764.
- [325] WILSON, H., AND MILITZER, B. Rocky core solubility in Jupiter and giant exoplanets. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012), 111101.
- [326] WOLSZCZAN, A., AND FRAIL, D. A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257 + 12. *Nature* 355 (1992), 145.
- [327] ZASTRAU, U., SPERLING, P., BECKER, A., BORNATH, T., BREDOW, R., DÖPPNER, T., DZIARZHYTSKI, S., FENNEL, T., FLETCHER, L. B., FÖRSTER, E., FORTMANN, C., GLENZER, S. H., GÖDE, S., GREGORI, G., HARMAND, M., HILBERT, V., HOLST, B., LAARMANN, T., LEE, H. J., MA, T., MITHEN, J. P., MITZNER, R., MURPHY, C. D., NAKATSUTSUMI, M., NEUMAYER, P., PRZYSTAWIK, A., ROLING, S., SCHULZ,

- M., SIEMER, B., SKRUSZEWICZ, S., TIGGESBÄUMKER, J., TOLEIKIS, S., TSCHENTSCHER, T., WHITE, T., WÖSTMANN, M., ZACHARIAS, H., AND REDMER, R. Equilibration dynamics and conductivity of warm dense hydrogen. *Phys. Rev. E* 90 (2014), 013104.
- [328] ZASTRAU, U., SPERLING, P., HARMAND, M., BECKER, A., BORNATH, T., BREDOW, R., DZIARZHYTSKI, S., FENNEL, T., FLETCHER, L. B., FÖRSTER, E., GÖDE, S., GREGORI, G., HILBERT, V., HOCHHAUS, D., HOLST, B., LAARMANN, T., LEE, H. J., MA, T., MITHEN, J. P., MITZNER, R., MURPHY, C. D., NAKATSUTSUMI, M., NEUMAYER, P., PRZYSTAWIK, A., ROLING, S., SCHULZ, M., SIEMER, B., SKRUSZEWICZ, S., TIGGESBÄUMKER, J., TOLEIKIS, S., TSCHENTSCHER, T., WHITE, T., WÖSTMANN, M., ZACHARIAS, H., DÖPPNER, T., GLENZER, S. H., AND REDMER, R. Resolving Ultrafast Heating of Dense Cryogenic Hydrogen. *Phys. Rev. Lett.* 112 (2014), 105002.
- [329] ZHA, C.-S., LIU, Z., AHART, M., BOEHLER, R., AND HEMLEY, R. High-Pressure Measurements of Hydrogen Phase IV Using Synchrotron Infrared Spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), 217402.
- [330] ZHA, C. S., LIU, Z., AND HEMLEY, R. J. Synchrotron infrared measurements of dense hydrogen to 360 GPa. *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012), 146402.
- [331] ZHANG, P., COHEN, R. E., AND HAULE, K. Effects of electron correlations on transport properties of iron at Earth's core conditions. *Nature* 517 (2015), 605.
- [332] ZHANG, X., AND SHOWMAN, A. P. Atmospheric Circulation of Brown Dwarfs: Jets, Vortices, and Time Variability. *The Astrophysical Journal Letters* 788 (2014), L6.
- [333] ZHARKOV, V., MAKALKIN, A., AND TRUBITSYN, V. Models of Jupiter and Saturn: I - initial data. *Astronomicheskii Zhurnal* 51 (1974), 829.
- [334] ZHARKOV, V., MAKALKIN, A., AND TRUBITSYN, V. Models of Jupiter and Saturn: II - structure and composition. *Astronomicheskii Zhurnal* 51 (1974), 1288.

- [335] ZHARKOV, V., AND TRUBITSYN, V. *Physics of Planetary Interiors (Tucson:Parchart)*. 1978.
- [336] ZHERNOKLETOV, M., GRYAZNOV, V., ARININ, V., BUZIN, V., DAVYDOV, N., IL'KAEV, R., IOSILEVSKIY, I., MIKHAILOV, A., NOVIKOV, M., KHRUSTALEV, V., AND FORTOV, V. Quasi-isentropic compression of dense gaseous helium at pressures up to 500 GPa. *JETP Letters* 96 (2012), 432.
- [337] ZIMAN, J. A theory of the electrical properties of liquid metals - the monovalent metals. *Philosophical Magazine* 6 (1961), 1013.

Liste der eigenen Veröffentlichungen

1. Peer-reviewed paper

- A1 Becker, A., Bethkenhagen, M., Wicht, J., Redmer, R.
Material properties for the interiors of massive Giant Planets and Brown Dwarfs
Astrophys. J. Suppl. S. (2015), in Vorbereitung
- A2 Becker, A., Lorenzen, W., Fortney, J. J., Nettelmann, N., Schöttler, M., Redmer, R.
Ab initio wide range equations of state for hydrogen (H-REOS.3) and helium (He-REOS.3) and their implications for the interior of Brown Dwarfs
Astrophys. J. Suppl. S. **215**, 21 (2014)
- A3 Knudson, M. D., Desjarlais, M. P. , Becker, A. , Lemke, R. W., Cochranne, C., Savage, M. E., Bliss, D. E., Redmer, R.
Direct observation of an insulator-to-metal transition in dense liquid hydrogen
Science **348**, 1455 (2015)
- A4 P. Davis, T. Döppner, J.R. Rygg, C. Fortmann, L. Divol, A. Pak, L. Fletcher, B. Holst, A. Becker, P. Sperling, R. Redmer, M.P. Desjarlais, P. Celliers, G.W. Collins, O.L. Landen, R.W. Falcone, S.H. Glenzer
Dissociation-induced metallization of dynamically compressed deuterium
Nature Geoscience (2015), in Revision
- A5 Gastine T., Wicht J., Duarte L. D. V., Heimpel M., Becker A.
Explaining Jupiter's magnetic field and equatorial jet dynamics
Geophysical Research Letters **41**, 5410 (2014)

- A6 Zastrau U., Sperling P., Becker A., et al.
Equilibration dynamics and conductivity of warm dense hydrogen
Phys. Rev. E **90**, 013104 (2014)
- A7 Zastrau U., Sperling P., Harmand M., Becker, A., et al.
Resolving Ultrafast Heating of Dense Cryogenic Hydrogen
Phys. Rev. Lett. **112**, 105002 (2014)
- A8 Becker A., Nettelmann N., Holst B., Redmer R.
Isentropic compression of hydrogen: Probing conditions deep in planetary interiors
Phys. Rev. B **88**, 045122 (2013)
- A9 French M., Becker A., Lorenzen W., Nettelmann N., Bethkenhagen M., Wicht J., Redmer R.
Ab Initio Simulations For Material Properties Along The Jupiter Adiabats
Astrophys. J. Suppl. S. **202**, 5 (2012)
- A10 Nettelmann N., Becker A., Holst B., Redmer R.
Jupiter models with improved ab initio hydrogen equation of state (H-REOS.2)
The Astrophysical Journal **750**, 52 (2012)

2. Buchkapitel

- Lorenzen, W., Becker, A., Redmer, R.
Progress in Warm Dense Matter and Planetary Physics
In: Graziani, F. (Hrsg.) et al., *Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter*
Springer (2014)
- Becker, A., Redmer, R.
Hydrogen at planetary conditions
In: Schwegler, E. und S.A. Bonev (Hrsg.), *Materials Under Extreme Conditions: Dense Hydrogen*
World Scientific (2015)

3. Konferenzproceedings

- Becker, A., French, M., Nettelmann, N., Redmer, R.
The effect of dissociation on material properties along the Jupiter adiabat
GSI Report, **2012-2**, 34 (2012)
- Becker, A., Nettelmann, N., Kramm, U., Lorenzen, W., French, M., Redmer, R.
Modeling Giant Planets and Brown Dwarfs
In: *The Astrophysics of Planetary Systems: Formation, Structure, and Dynamical Evolution Proceedings IAU Symposium No. 276, 2010*
A. Sozzetti, M. G. Lattanzi & A. P. Boss, eds. , 473 (2011)
- Becker, A., Nettelmann, N., Redmer, R.
Modeling Giant Planets and Brown Dwarfs
GSI Report, **2011-2**, 44 (2011)

Liste der Fachvorträge

- A. Becker, M. Bethkenhagen, W. Lorenzen, J. J. Fortney, N. Nettelmann, M. Schöttler, R. Redmer
Modeling Giant Planets and Brown Dwarfs using ab initio equation of state data for hydrogen and helium
Matter in Extreme Conditions from MATerial science to PLANetary physics
Montgenevre, Frankreich (2015)
- A. Becker, M. Bethkenhagen, W. Lorenzen, J. J. Fortney, N. Nettelmann, M. Schöttler, R. Redmer
Modeling Giant Planets and Brown Dwarfs using ab initio equation of state data for hydrogen and helium
Eingeladener Vortrag im astrophysikalischen Kolloquium der Universität Göttingen
Göttingen, Deutschland (2014)
- A. Becker, M. Bethkenhagen, W. Lorenzen, J. J. Fortney, N. Nettelmann, M. Schöttler, R. Redmer
Interior structure of Brown Dwarfs and their material properties
Joint Workshop on High Pressure, Planetary, and Plasma Physics (HP4)
Rostock, Deutschland (2014)
- A. Becker, W. Lorenzen, J. J. Fortney, N. Nettelmann, M. Schöttler, R. Redmer
Modeling Brown Dwarfs using ab initio equation of state data
Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS)
Santa Fe, New Mexico, USA (2014)
- A. Becker, W. Lorenzen, J. J. Fortney, N. Nettelmann, M. Schöttler, R. Redmer
Modeling brown dwarfs using ab initio equation of state data
Joint Workshop on High Pressure, Planetary, and Plasma Physics (HP4)
Berlin, Deutschland (2013)

- A. Becker, W. Lorenzen, N. Nettelmann, R. Redmer
Interior models and mass radius relations of Brown Dwarfs
 Norddeutsches Astrophysik-Kolloquium,
 Rostock, Deutschland (2013)
- A. Becker, M. French, N. Nettelmann, R. Redmer
The effect of dissociation on material properties along the Jupiter adiabat
 32th International Workshop on Physics of High Energy Density in Matter,
 Hirschegg, Österreich (2012)
- A. Becker, N. Nettelmann, W. Lorenzen, M. French, R. Redmer
Material properties along the Jupiter adiabat
 Norddeutsches Astrophysik-Kolloquium,
 Hamburg, Deutschland (2012)
- A. Becker, N. Nettelmann, R. Redmer
Modeling Giant Planets and Brown Dwarfs
 31th International Workshop on Physics of High Energy Density in Matter,
 Hirschegg, Österreich (2011)
- A. Becker
Interior models of gas giants and Brown Dwarfs
 Norddeutsches Astrophysik-Kolloquium,
 Kiel, Deutschland (2011)

Danksagung

Zum Ende der Arbeit möchte ich allen Menschen danken, die mich während meines Promotionsstudiums unterstützt und fachlich sowie menschlich weitergebracht haben. Zuerst danke ich Ronald Redmer, der mir die Möglichkeit bot, dieses Thema zu bearbeiten und mich in vielen auch nicht-fachlichen Dingen stets unterstützt hat. Des Weiteren konnte ich von Winfried Lorenzen, Nadine Nettelmann, Bastian Holst und Martin French sehr viel über Planetenmodellierung und DFT-MD Rechnungen, sowie von Winfried und Basti sehr viel über Systemadministration lernen. Ganz besonders sind die Menschen hervorzuheben, mit denen ich gemeinsam viel Neues lernen und Projekte vorantreiben konnte und die meine Einsatzfreude geteilt haben: allen voran Mandy Bethkenhagen sowie Philipp Sperling, Clemens Kellermann, Manuel Schöttler, Daniel Cebulla und Nils Arbeiter. Waltraud Dulinski möchte ich hier natürlich auch für ihre freundliche und kompetente Art im Umgang mit dem Bürokratiealltag nennen. Allen anderen Mitgliedern der AG Statistische Physik danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre und die oft interessanten Gespräche. Bei letzteren dürfen Sonja Lorenzen, Volker Mosert, Thomas Keil und Niels-Uwe Bastian nicht unerwähnt bleiben. Für die spannende Zusammenarbeit in den Kollaborationen danke ich Tilo Döppner, Marcus Knudson, Mike Desjarlais, Siegfried Glenzer und Paul Davis sowie Johannes Wicht, Andrea Bossmann und Thomas Gastine.

Meinen Studenten, von denen ich viel über gute Lehre an der Uni lernen konnte, sei hier ebenfalls gedankt, insbesondere auch Marie Pierce, Merten Siegfried und Sarah Schätzke (alle vom FSR) für den Einsatz um meinen Förderpreis für Lehre. Ohne den Rückhalt meiner Familie und meiner Freunde wären die fünf Jahre ungleich schwieriger geworden. Ein großes Dankeschön für alles an meine Brina (IMDSS) und unsere Sophia sowie an meine Eltern Sonja und Werner, meinen Bruder Jens und Vicky, an mein Patenkind Ina, sowie an Jenny Simon, Ron Henkel, Katja Kriebel, Jan Müller, Marcus Deppner und meine Cousine Christin, die mir vor 17 Jahren die Idee einer Promotion in den Kopf gesetzt hatte.

Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe ausschließlich unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt zu haben.

Rostock, 24. April 2015

Andreas Becker