

Zustandsgleichung von Wasserstoff
bei hohen Drücken im Mbar-Bereich

Hauke Juranek

Oktober 2004



UNIVERSITÄT ROSTOCK

Zustandsgleichung von Wasserstoff bei hohen Drücken im Mbar-Bereich

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

vorgelegt von
Hauke Juranek, geb. am 12. November 1971 in Aalen
aus Rostock

Gutachter:

1. Prof. Dr. Ronald Redmer
2. Prof. Dr. Werner Ebeling
3. Prof. Dr. Wolf-Dietrich Kraeft

Tag der Verteidigung: Donnerstag, dem 16. Dezember 2004

Rostock, den 29. Oktober 2004 (Tag der Einreichung)

Vorwort

Die vorliegende Doktorarbeit setzt die in Rostock begonnenen Arbeiten zur Zustandsgleichung von Wasserstoff fort. Von Stefan Nagel wurde eine Fluid Variational Theory (FVT) für ein Einkomponentensystem benutzt. In meiner Diplomarbeit wurde die FVT mit exakteren Ausdrücken weiterentwickelt. In der vorliegenden Arbeit wurde die FVT für ein binäres System ausgebaut zur Beschreibung eines Gemisches aus Wasserstoffatomen und -molekülen. Die FVT wurde mit der von Alex Bunker in Rostock entwickelten Monte-Carlo (MC) Simulation abgeglichen. Von Werner Ebeling ursprünglich eingeführte Padénäherungen werden zur Beschreibung ionisierten Wasserstoffs untersucht. Eine von Gerald I. Kerley eingeführte dichteabhängige Zustandssumme der Atome wird für das chemische Gleichgewicht zwischen Atomen und ionisierten Wasserstoff verwendet. Aus einer Kombination von FVT und Idealbeiträgen des ionisierten Wasserstoffs entstand eine selbstkonsistente Zustandsgleichung (ZGL) für Wasserstoff im chemischen Bild unter hohen Drücken mit den Spezies Molekül, Atom, Proton und Elektron. Die ZGL wird in dieser Arbeit vorgestellt. Wesentliche Beiträge dieser Arbeit sind die Entwicklung eines Programms zur Berechnung der Zustandsgleichung, die quantitative Übereinstimmung der Berechnungen mit den Experimenten und die Infragestellung eines Phasenübergangs.

Adresse:

Universität Rostock
Institut für Physik
AG Statistische Physik
18051 Rostock
Germany

Fax: +49 381 498-6912

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

Email des Betreuers: ronald.redmer@uni-rostock.de

Email des Autors: hauke.juranek@uni-rostock.de

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
1.1 Struktur der Arbeit	9
1.2 Vereinbarung der Schreibweisen	9
2 Experimente	13
2.1 Diamantstempel	13
2.2 Einfachstoßexperimente	13
2.3 Mehrfachstoßexperimente	17
3 Modelle	21
3.1 Physikalisches und chemisches Bild	21
3.2 Ursprung der FVT	23
3.3 Ursprung der Padénäherungen	23
3.4 Andere Modelle	24
3.4.1 Entwicklungen	24
3.4.2 Monte Carlo Simulationen	28
3.4.3 Molekulardynamik mit Dichte Funktional Theorie (DFT)	29
4 FVT: H₂ und H	31
4.1 Idealanteile und interne Zustandssumme	31
4.2 Wechselwirkungsanteile - FVT	34
4.2.1 Das Wechselwirkungspotential	35
4.3 Ergebnisse der FVT	37
4.3.1 Chemisches Gleichgewicht	38
4.3.2 Gültigkeitsbereich	39
4.3.3 thermodynamische Größen	43
5 Padénäherung: H⁺	51
5.1 Anteile der Padénäherungen	51
5.2 Ergebnisse der Padénäherung	67
6 Partiell ionisiertes Plasma: H₂, H und H⁺	69
6.1 Reduziertes Volumenkonzept	70

6.2	Polarisation	70
6.3	Zustandssumme der Atome	71
6.4	Ergebnisse	72
7	Anwendung der EOS-Daten und des Modells	81
7.1	Modellberechnungen für GSI-Experimente	81
7.2	Planetenmodelle	82
7.3	Leitfähigkeit	83
7.4	Anwendung des Modells auf andere Fluide	84
8	Zugehöriges C++ Programm	87
9	Zusammenfassung & Ausblick	91
A	Konstanten	95
A.1	Konstanten und Standardfunktionen	95
A.2	Konstanten speziell für Wasserstoff	96
A.3	Konstanten speziell für Deuterium	96
B	Funktionen	97
B.1	Paarkorrelationsfunktion für zwei Komponenten	97
B.2	Plasmaparameter	98
B.3	Fermi-Dirac Integrale	100
B.3.1	Zimmermann-Formeln für Fermi-Dirac Integrale	100
B.3.2	Stolzmann-Formeln für Fermi-Dirac Integrale	101
C	Tabellen	103
C.1	Umrechnungstabellen	103
	Literaturverzeichnis	120

Kapitel 1

Einleitung

Zustandsgleichungen beschreiben die Eigenschaften von Materialien. Mit ihrer Hilfe lässt sich vorhersagen, welche Dichte, elektrische Leitfähigkeit, Kompressibilität und vieles mehr das Material bei gegebener Temperatur und gegebenem Druck hat. Die Zustandsgleichung lässt sich über Experimente bestimmen. Eine andere Möglichkeit bieten Modelle, die die experimentellen Daten reproduzieren. Mit Hilfe der Modelle lassen sich die Materialeigenschaften unter anderen Bedingungen vorhersagen. Die Zustandsgleichung für Aluminium ist über große Druckbereiche gut bekannt und am häufigsten erforscht worden. Es wurden experimentell und theoretisch alle Materialien aus einer Sorte Atomen in den experimentell zugänglichen Druckbereichen gut bestimmt mit der Ausnahme von Wasserstoff. Daher gibt es eine besondere Motivation, Wasserstoff zu erforschen. Sie röhrt aus drei Besonderheiten:

- Das Thomas-Fermi Modell ist für Vielteilchensysteme aus Atomen der Metalle und deren Ionen für $Z \gg 1$ relativ genau. Für Wasserstoff kann es nicht mehr benutzt werden. Ionisierter Wasserstoff besteht lediglich aus den Punktteilchen Proton und Elektron, so dass eine präzise quantenmechanische Beschreibung erforderlich ist. (siehe z.B. [Kemp und Meyer-ter Vehn, 1998](#))
- Das Verhalten von Wasserstoff unter Mbar Drücken ist nach den Stoßexperimenten mit den Nova und Nike Lasern anders als die bis dahin üblicherweise benutzten Zustandsgleichungen voraussagten (siehe z.B. [Cauble u. a., 2000; Mostovych u. a., 2000](#)).
- In der Astrophysik besteht zur Beschreibung von Planeten großes Interesse an einer präzisen Zustandsgleichung für Wasserstoff. Immerhin besteht das Universum gemessen an der Zahl der Atome zu 90% aus Wasserstoff. Bezogen auf die Masse besteht das Universum aus weniger Wasserstoff. bei Jupiter beträgt der Massenanteil zwischen 62 und 79% (siehe z.B. [Saumon u. a., 2000; Guillot, 1999](#)).

Erfolgreich konnte Wasserstoff in den Grenzbereichen kleiner und großer Dichten und Temperaturen beschrieben werden. Bis heute stellt der Zwischenbereich eine Herausforderung dar. Es gibt bisher kein allgemein akzeptiertes Bild von Wasserstoff in dem Übergangsbereich zwischen neutralem molekularem Wasserstoff und dem vollständig ionisierten.

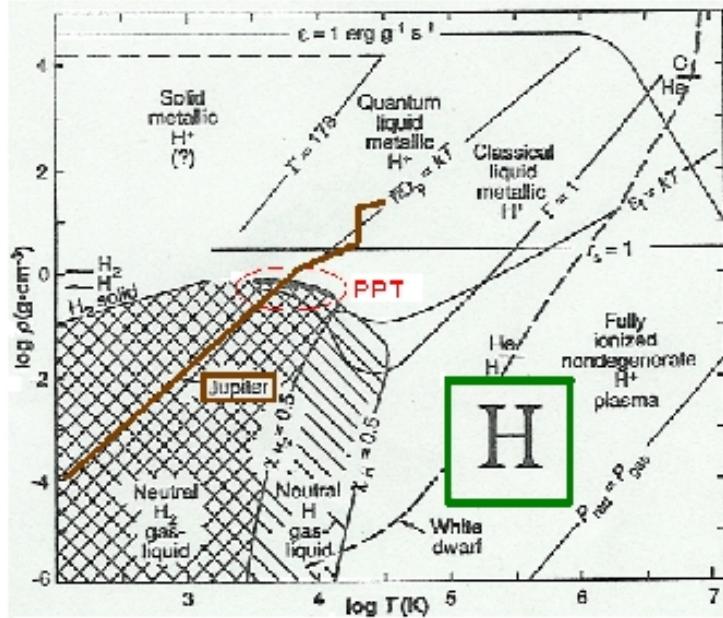


Abbildung 1.1: Phasendiagramm für Wasserstoff von Stolzmann (2001). Gezeigt werden mögliche Bereiche unterschiedlicher Phasen von Wasserstoff vom molekularen Festkörper bis hin zum vollständig ionisierten Wasserstoff. Für den Planeten Jupiter und für weiße Zwerge ist dargestellt, welche Zustände von Wasserstoff in deren Inneren vorkommen könnten.

In diesem Übergangsbereich wird seit Wigner und Huntington (1935) ein Phasenübergang vermutet. Vorausgesetzt er existiert, so wird er sich nach den bisherigen Arbeiten von Haronska u. a. (1987); Ebeling u. a. (1988); Chacham u. a. (1992); Chabrier u. a. (1992); Schlanges u. a. (1995); Beule u. a. (1999b) im Mbar-Bereich befinden. An diesem Phasenübergang kommt eine Besonderheit hinzu: Der vollständig ionisierte Wasserstoff soll eine Leitfähigkeit besitzen, die denen von Metallen entspricht. Häufig wird deshalb von metallischem Wasserstoff gesprochen.

Drei Wege führen zur Bestimmung einer Zustandsgleichung: Experimente, Lösen der physikalischen Grundgleichungen und Simulationen mit den physikalischen Grundeigenschaften. Gegenstand der Forschung sind Bereiche, an denen Experimente an ihre Grenzen stoßen, die Mathematik der physikalischen Grundgleichungen unbeherrschbar wird oder Simulationsrechnungen mit physikalischen Grundeigenschaften für die Rechentechnik zu aufwändig werden.

Wasserstoff mit Hilfe eines experimentellen Aufbaus auf 1 Mbar zu komprimieren ist im Gegensatz zu allen anderen Materialien eine große Herausforderung: Wasserstoff diffundiert nahezu durch alle Materialien hindurch. Bei den Experimenten geht ein großer Teil der Kompressionsleistung durch die Kammer, die den Wasserstoff einschließt, verloren. Zudem spielen sich Stoßexperimente im Nanosekundenbereich ab. Messungen sind dementsprechend aufwändig. Selbst kleinste Ungenauigkeiten im Aufbau können das Experiment in Frage stellen, so wie es bei den Nova-Experimenten durch Nellis (2002) geschehen ist.

Das Lösen der physikalischen Grundgleichungen ist meist mit Vereinfachungen verbunden. Vereinfachungen lassen sich in Grenzbereichen gut begründet vornehmen. So liefert zum Beispiel für Wasserstoff die Debye-Hückel-Näherung hervorragende Ergebnisse für kleine Dichten und hohe Temperaturen. Die Eigenschaften von Wasserstoff im Mbar-Bereich liegen gerade zwischen zwei Grenzbereichen: Dem molekularen und dem vollständig io-

nisierten Wasserstoff. Bereits bei molekularem Wasserstoff lassen sich die Eigenschaften nicht mehr direkt aus den Grundgleichungen bestimmen. Um die quantenmechanischen Eigenschaften des Systems zu berücksichtigen, werden effektive Wechselwirkungspotentiale verwendet. Mit diesen Potentialen lassen sich alle Experimente mit rein molekularem Wasserstoff akkurat beschreiben.

Wir entwickeln diesen Ansatz weiter, kombinieren ihn mit Zustandsgleichungen der Atome und des vollständig ionisierten Wasserstoffs aus Protonen und Elektronen und bestimmen das Verhältnis über das chemische Gleichgewicht. Dieses ist eine Behandlung im chemischen Bild, in dem die auftretenden Teilchen fest vorgegeben sind.

Im Gegensatz dazu gehen die Simulationen von den kleinsten relevanten Elementarteilchen aus; also dem sogenannten physikalischen Bild. Für Wasserstoff sind dies im Mbar-Bereich Elektronen und Protonen. Während der Simulationen sollen sich die auftretenden Teilchen wie zum Beispiel Atome, Moleküle oder Ketten aus Protonen und Elektronen bilden.

Stimmen Experiment, Rechnungen im chemischen Bild und Simulationen im physikalischen Bild überein, so gibt dieses Gewissheit über die Richtigkeit der Messergebnisse, die Vorstellung über Wasserstoff und der physikalischen Grundgesetze. Ein wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit ist deshalb der Vergleich zwischen Experimenten, Modellen im chemischen Bild und den Simulationen.

Ziel der Arbeit ist die Beschreibung von Wasserstoff im chemischen Bild. Dazu wird Wasserstoff als Mehrkomponentensystem aus Atomen H, Molekülen H_2 , Protonen p und Elektronen e beschrieben. Interessant dabei ist, wie sich der Nichtmetall-Metall-Übergang gestaltet und ob ein Phasenübergang auftritt. Die Daten aus der Zustandsgleichung sollen für andere Rechnungen benutzt werden wie z.B. zur Gestaltung eines Stoßexperiments im Labor an der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt, für Leitfähigkeitsrechnungen und zur Beschreibung des Aufbaus von Planeten.

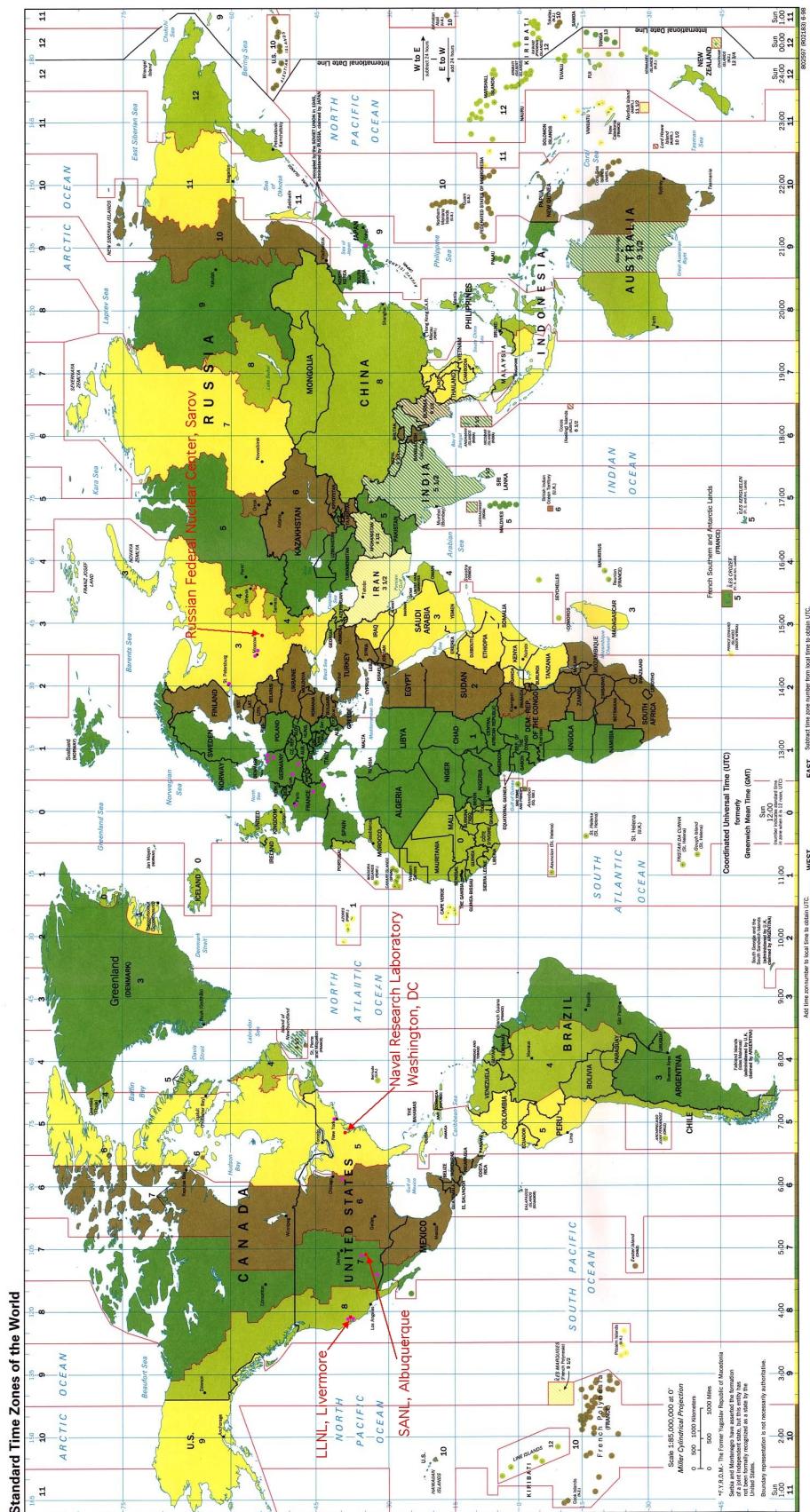


Abbildung 1.2: Forschungsstatten zu Wasserstoff bei hohen Drcken. In Rot sind die Orte mit Stoexperimenten gekennzeichnet: Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), Sandia National Laboratory (SANL), Naval Research Laboratory, Russian Federal Nuclear Center. In Pink sind Forschungsstatten oder Orte mit Diamantstempelexperimenten oder ausschlielich theoretischen Arbeiten zur Zustandsgleichung gekennzeichnet: (5) Geophysical Laboratory in Washington, in Deutschland: (6) die Universitten in Greifswald, Rostock, Berlin, (7) GSI im Darmstadt, Erlangen, MPI in Mnchen, in Frankreich: (8) Paris, (9) Lyon, (10) Nice, in Russland: Chernogolovka, Moskau, Sankt Petersburg, in Israel das Weizmann Institut in Negev.

In der Abbildung 1.2 werden die Forschungsstandorte gezeigt, die engen Bezug zu dieser Arbeit haben. Lediglich an vier Standorten konnte Wasserstoff auf 1 Mbar komprimiert werden: Mit dem Nova-Laser am Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) (z.B. Cauble u.a., 1997), dem Nike Laser am Naval Research Laboratory in Washington D.C. (z.B. Mostovych u.a., 2001b), der Z-Maschine am Sandia National Laboratory (SANL) in Albuquerque (z.B. Knudson u.a., 2001) und einer kugelförmigen Sprengkammer am Russian Federal Nuclear Center in Sarov (z.B. Belov u.a., 2002). Darüber hinaus konnte mit Mehrfachstößen am LLNL 1 Mbar mit einer Gaskanone erreicht werden (z.B. Holmes u.a., 1995; Nellis u.a., 1999). Alle weiteren aufgeführten Standorte beschäftigen sich in den theoretischen Arbeiten mit der Zustandsgleichung von Wasserstoff oder wenden sie auf Planetenmodelle an.

1.1 Struktur der Arbeit

In Kapitel 2 stellen wir die verschiedenen Experimente vor, mit denen Wasserstoff auf 1 Mbar komprimiert werden kann. Die Eigenschaften und Besonderheiten erläutern wir.

Kapitel 3 beschreibt die meisten anderen Modelle und die grundlegende Herangehensweise zur Beschreibung von Wasserstoff. Wir diskutieren die wesentlichen Unterschiede und gehen auf die Kritikpunkte ein.

In den folgenden drei Kapitel entwickeln wir eine Zustandsgleichung für Wasserstoff im chemischen Bild. Kapitel 4 beschreibt die Fluid Variational Theory (FVT), die wir zur Modellierung eines Gemisches aus den neutralen Wasserstoffatomen und -molekülen weiterentwickelt haben. Kapitel 5 diskutiert die Padéformeln zur Beschreibung des vollständig ionisierten Wasserstoffs. In Kapitel 6 wird das Gemisch aus vollständig ionisierten und neutralen Wasserstoff behandelt; also das Gemisch aus Elektronen, Protonen, Atomen und Molekülen. Hierzu kombinieren wir die FVT mit den Padéformeln und alternativ nur mit den Idealbeiträgen der Elektronen und Protonen zusammen mit einer dichteabhängigen Zustandssumme der Atome. Die erste Variante deutet auf einen Phasenübergang hin, während bei der zweiten keiner vorkommt. Dies ist das wichtigste Ergebnis dieser Arbeit. Ein weiteres hervorzuhebendes Ergebnis ist die quantitativ gute Übereinstimmung mit den Experimenten. In diesen drei Kapiteln vergleichen wir deshalb durchgehend mit den Experimenten.

Am Ende dieser Arbeit fassen wir in Kapitel 9 die entscheidenden Ergebnisse zusammen. In der Anlage sind die in dieser Arbeit verwendeten Konstanten und komplexere mathematische Ausdrücke im Detail aufgeführt. Wir schließen die Arbeit mit einem Ausblick und einer Danksagung.

1.2 Vereinbarung der Schreibweisen

Etliche Größen tauchen häufiger auf. Wir benennen sie hier zu Beginn, um deren Bedeutung nicht aus vorhergehenden Abschnitten suchen zu müssen. Wir schreiben Variablen kursiv

und Einheiten im normalen Textmodus. In eckigen Klammern stehen die Parameter einer vorangestellten Funktion $f[x - y]$. Damit kann dieses nicht mit der Multiplikation von f mit $x - y$ verwechselt werden: $f(x - y)$.

Wir betrachten unendlich ausgedehnte Systeme, also Systeme ohne Rand oder Oberfläche. Die extensiven Zustandsgrößen formen wir gelegentlich in intensive Größen um. Es bietet sich an, einige Größen in dimensionslosen Einheiten anzugeben:

$$f = \frac{F}{Nk_B T} : \text{freie Energie} \quad (1.1)$$

$$u = \frac{U}{Nk_B T} : \text{innere Energie} \quad (1.2)$$

$$s = \frac{S}{Nk_B} : \text{Entropie} \quad (1.3)$$

$$g = \frac{\mu}{k_B T} : \text{chemische Potential} \quad (1.4)$$

$$p = \frac{P}{nk_B T} : \text{Druck} \quad (1.5)$$

Daraus ergeben sich die Relationen:

$$u = T \frac{\partial f}{\partial T} \quad (1.6)$$

$$s = f + u \quad (1.7)$$

$$g = f + n \frac{\partial f}{\partial n} \quad (1.8)$$

$$p = g - f = n \frac{\partial f}{\partial n} \quad (1.9)$$

$$c_s = \sqrt{\left. \frac{\partial p}{\partial n} \right|_s} : \text{hydrodynamische Schallgeschwindigkeit} \quad (1.10)$$

$$c_V = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_V : \text{isochore spezifische Wärmekapazität} \quad (1.11)$$

$$c_P = \left. \frac{\partial u}{\partial T} \right|_P : \text{isobare spezifische Wärmekapazität} \quad (1.12)$$

Wir sprechen weitgehend nur von Wasserstoff. Die Ergebnisse können auf Deuterium übertragen werden. Lediglich die zugehörigen Größen müssen geändert werden. Die für Wasserstoff und Deuterium spezifischen Konstanten sind in den Anlagen A.2 und A.3 aufgeführt. Experimentiert wurde überwiegend mit Deuterium. Die vergleichenden Rechnungen wurden dazu mit den Deuteriumkonstanten durchgeführt. In erster Näherung lassen sich die Rechnungen für Wasserstoff mit Deuteriumexperimenten vergleichen. Dazu reicht es für den halb so schweren Wasserstoff aus, einen Faktor 2 in der Deuteriumdichte zu berücksichtigen. Für genaue Rechnungen macht sich in der internen Zustandssumme das

doppelt so schwere Deuterium bemerkbar. Zum Beispiel bei den Stoßexperimenten wird Deuterium dadurch kompressibler.

Wir schreiben H für ein Wasserstoffatom, H_2 für ein Wasserstoffmolekül, $p = H^+$ für ein Wasserstoffion, also Proton, und e für ein Elektron.

Benutzt wurden die Naturkonstanten aus [Konstanten \(2003\)](#). Sie sind in Abschnitt A.1 zusammengestellt.

Kapitel 2

Experimente

Wasserstoff als sehr flüchtiges und explosives Material wurde, verglichen mit allen anderen Materialien, erst spät auf Drücke von über 1 Mbar komprimiert. Wasserstoff musste geschickt in einer Probenkammer eingeschlossen werden. Bei den Kompressionsversuchen geht ein großer Teil der Energie in das Komprimieren der Kammer verloren. Zusätzlich musste Wasserstoff mit hohem Aufwand auf unter 20 K in den festen Aggregatzustand gekühlt werden, um nicht vorher schon aus der Kammer herauszudiffundieren. Mit verschiedenen Verfahren konnte Wasserstoff in den letzten 20 Jahren in einem größeren Dichte- und Temperatur- beziehungsweise Druckbereich komprimiert werden. Sämtliche Ergebnisse sind in der Abbildung 2.7 zusammengestellt. Im Folgenden stellen wir die verschiedenen experimentellen Verfahren vor.

2.1 Diamantstempel

Experimente mit Diamantstempeln konnten Wasserstoff nur bis maximal 30 GPa komprimieren. Bei der Kompression muss die Temperatur klein gehalten werden, um das Verdampfen der Diamantstempel zu verhindern. Experimente mit Diamantstempel können so die 0 K Isotherme bestimmen. Dabei wird die Wasserstoffprobe zwischen den Spitzen zweier Diamantstempel komprimiert. Über einen Hebelmechanismus werden die Diamantstempel zusammengedrückt. Genaue Beschreibungen dieser Verfahren finden sich bei [Mao und Hemley \(1994\)](#). Wenig beachtet werden dabei Betrachtungen von [Clark u. a. \(1995\)](#), die die Gültigkeit der Ergebnisse bei den besonders hohen Drücken in Frage stellen.

2.2 Einfachstoßexperimente

Mit Stoßexperimenten kann die Probe, in diesem Fall Wasserstoff, mit hohen Energien komprimiert werden. Bei den statischen Diamantstempelexperimenten steigt mit langsam erhöhter Kraft der Druck an. Im Gegensatz dazu werden bei den Stoßexperimenten hohe Drücke durch einen großen Impuls erzeugt. Dabei wird die Probe mit hoher Geschwindigkeit mit einem Kolben zusammengepresst. In der Probe gibt es dabei zwei Zustände:

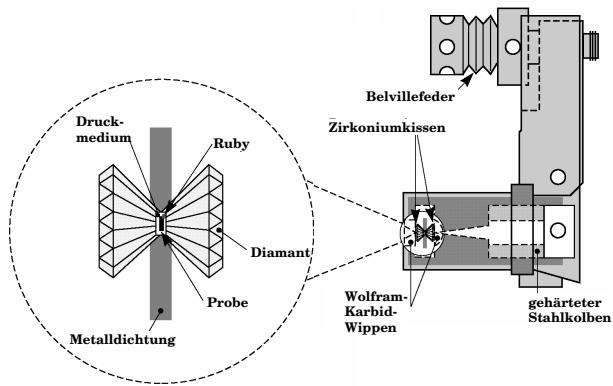


Abbildung 2.1: Schema eines Diamantstempel experiments aus Akella (1996). Über einen Hebelarm werden zwei Diamantspitzen aufeinander gepresst. Zwischen den Spitzen befindet sich das zu untersuchende Material.

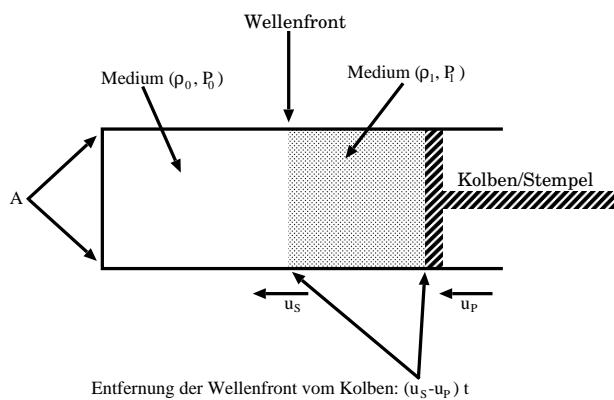


Abbildung 2.2: Schema der Verhältnisse in einem Stoßexperiment. Ein Kolben drückt das untersuchte Material zusammen und zwar so schnell, dass sich eine Stoßfront bildet, die sich mit der Geschwindigkeit u_s schneller bewegt als sich der Schall in dem Material der Ausgangsdichte ρ_0 ausbreitet.

Erstens, der Teil, der von der Kompression noch nichts erfahren hat. Er befindet sich im Ausgangszustand. Zweitens, der Teil, der von der Kompression schon erfasst wurde. Zwischen beiden Teilen gibt es eine strenge Trennlinie: die Stoßfront. Dazu muss sich der Kolben schneller bewegen als die Schallgeschwindigkeit des Materials. Andernfalls gibt es keine Stoßfront. Aus den Massen-, Energie- und Impulserhaltungssätzen lässt sich einfach eine Relation zwischen dem Ausgangszustand (vor der Stoßfront) und dem komprimierten Endzustand (hinter der Stoßfront) ableiten wie von Juranek (1998) vorgeführt wird. Eine wichtige Relation heißt Hugoniotgleichung: $U_1 - U_0 = 1/2(P_1 + P_0)(V_0 - V_1)$. Sie enthält keine experimentabhangigen Geschwindigkeiten mehr, sondern nur noch übliche thermodynamische Größen wie die innere Energie U , den Druck P und das Volumen V . Damit ist klar: Über diese Gleichung wird die Verbindung zwischen der Theorie, also einer Zustandsgleichung, und dem Experiment hergestellt.



Abbildung 2.3: Stoßexperiment mit Sprengstoff in Chernogolovka. Linkes Bild zeigt den experimentellen Aufbau. Rechtes zeigt die Sprengkammer.

Am einfachsten lassen sich Stoßkompressionen mit Hilfe von Sprengstoff realisieren. In Abbildung 2.3 ist ein Experiment aus Chernogolovka in Russland gezeigt. Über ein Kupferrohr wird die Probe mit Stickstoff gekühlt. Glasfaserkabel ermöglichen den Datenaustausch. Die Probenkammer ist mit Plastiksprengstoff umgeben. Nach der Sprengung ist von dem Aufbau nichts mehr vorhanden. Zum Schutz der Umgebung wird die Sprengung in einer verschlossenen Betonhalbkugel vorgenommen.

Die Kompressionsgeschwindigkeit wird bei Sprengstoff durch dessen Schallgeschwindigkeit begrenzt. Um mittels Explosivstoffen doch noch zu höheren Geschwindigkeiten zu kommen, wurden zweistufige Gaskanonen gebaut wie Abbildung 2.4 zeigt. Dabei wird in der ersten Stufe ein Explosivstoff gezündet, der Wasserstoff komprimiert. Sobald der Wasserstoff komprimiert ist, zerbricht er ein Druckventil und beschleunigt ein wesentlich kleineres Geschoß. Da Wasserstoff eine der höchsten Schallgeschwindigkeiten besitzt, wird bei dessen Ausdehnung das zweite Geschoß auf größere Geschwindigkeiten beschleunigt als

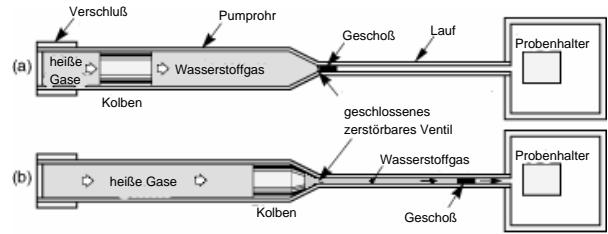


Abbildung 2.4: Gaskanonen im Lawrence Livermore Laboratory (LLNL) und schematischer Aufbau aus Holmes (2000).

in der ersten Stufe mittels Sprengstoff erreichbar ist. Mit Wasserstoff haben Nellis u. a. (1981); Holmes u. a. (1995) auf diese Weise experimentiert.

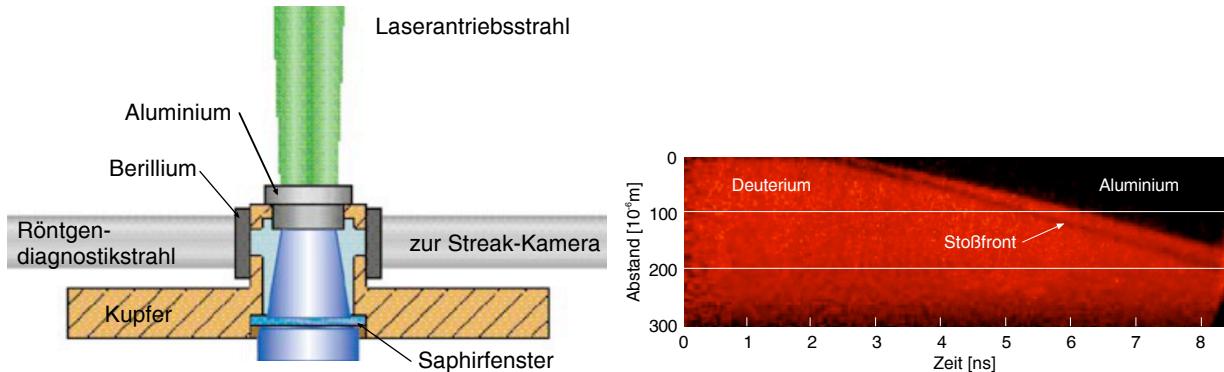


Abbildung 2.5: Schema des Nova Laserexperiments und zugehöriges Streakkamerabild aus Cauble (1999).

Um nun die Kompressionsgeschwindigkeiten weiter zu erhöhen, wurde der Nova Laser von Cauble u. a. (1997) benutzt. Sie richteten den Laser auf eine Aluminiumplatte. Durch die extreme Erhitzung der Oberfläche fliegen die Oberflächenatome weg. Dieses führt zu einem Rückstoß ähnlich wie bei einer Rakete und beschleunigt die Platte auf bis zu 28 km/s. Der Aufbau hierfür ist in Abbildung 2.5 gezeigt. Mittels eines Diagnos-tikstrahls kann der zeitliche Verlauf des Experiments beobachtet werden. In der Abbildung ist hierzu ein Streakkamerabild gezeigt. Die Trennlinie zwischen dem Deuterium und dem Aluminium bestimmt die Kompressionsgeschwindigkeit. Im Deuterium entsteht eine zweite Trennlinie zwischen dem komprimierten und dem noch nicht komprimierten Deuterium: die Stoßfront. Mit dieser Linie berechnen wir die Stoßfrontgeschwindigkeit. Mit beiden Geschwindigkeiten lässt sich die Hugoniotgleichung bestimmen.

Mit dem Nova Laser wurden als erstes Drücke oberhalb von 1 Mbar erreicht. Sie wurden

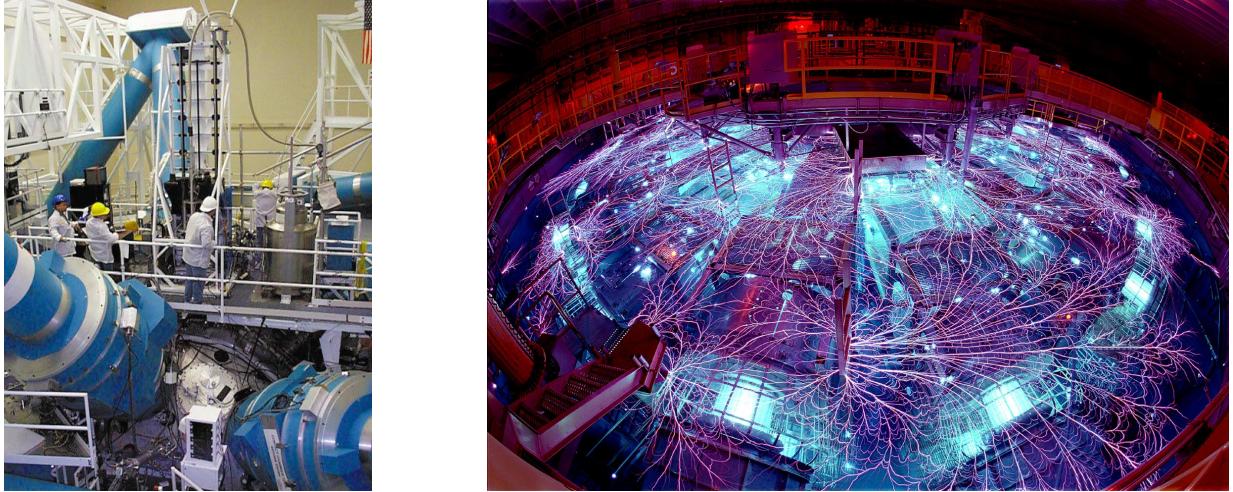


Abbildung 2.6: Die beiden Experimente mit widersprüchlichem Ergebnis. Links: Aufbau der Experimentierkammer des Nova Lasers aus [Cauble \(1999\)](#). Rechts: Freisetzung der gespeicherten Energie bei der Z-Maschine im Sandia National Laboratory (SANL) in Albuquerque aus [Perrine \(2004\)](#).

mit den Experimenten des Nike Lasers durch [Mostovych u. a. \(2000\)](#) bestätigt. Im Sandia National Laboratory (SANL) wurde statt eines Lasers deren Z-Maschine von [Knudson u. a. \(2001\)](#) genutzt. In einem gigantischen Kondensator wird eine Energie von bis zu 230 TW gespeichert. Wird diese entladen, entsteht ein extremer Strom, der ein starkes Magnetfeld mit einer Leistung erzeugt, die nach [Perrine \(2003\)](#) dem 80 fachen der Weltenergieleistung entsprechen soll. Dieses Magnetfeld drückt den Leiter zusammen. Zur Kompression von Wasserstoff wurde die Probe in den Leiter eingebaut. Überraschenderweise wichen die Ergebnisse der Z-Maschine von den Daten des Nova Lasers erheblich ab, so wie es in Abbildung 2.7 zu sehen ist. Seitdem wird darüber diskutiert, woher die Unterschiede kommen. [Nellis \(2002\)](#) behauptet, die Nova-Daten seien falsch. [Da Silva u. a. \(1997\)](#) hätten nicht die Verkantung der beschleunigten Aluminiumplatte berücksichtigt. Er wies nach, dass bereits minimale Winkel zu großen Fehlerbalken führen. Den Ergebnissen der Z-Maschine wird mehr Vertrauen geschenkt, da die Bestimmung der Daten auf der Kenntnis der Aluminium-Zustandsgleichung beruht. Diese galt bisher als äußerst genau. Nun zweifeln [Ross u. a. \(2004\)](#) die Genauigkeit der Aluminiumzustandsgleichung in gerade diesem Dichte- und Druckbereich an. Bilder der beiden Geräte, dem Nova-Laser und der Z-Maschine, sind in Abbildung 2.6 gezeigt.

2.3 Mehrfachstoßexperimente

Die Einfachstoßexperimente erzeugen hohe Temperaturen und Drücke, während die Diamantstempelverfahren hohe Dichten und Drücke erzeugen. Wünschenswert sind Ergebnisse auch in den Zwischenbereichen der hohen Dichten und Temperaturen. Bereits bei den Ein-

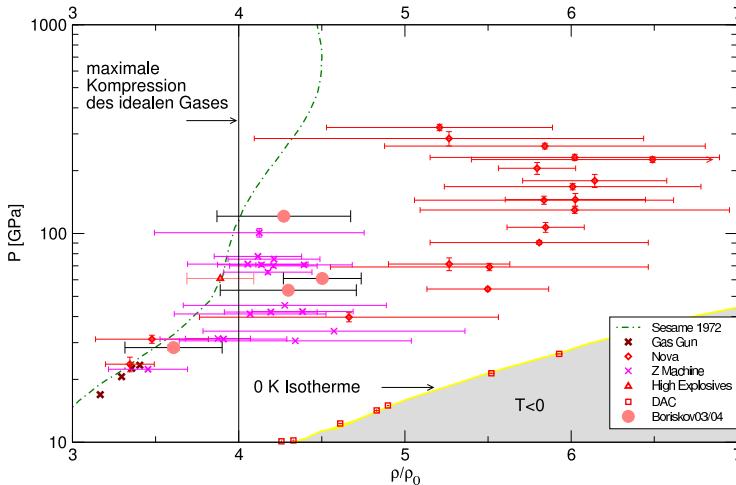


Abbildung 2.7: Einfachstoßexperimente. Dargestellt sind die Stoßexperimente mit der Gaskanone von Holmes u. a. (1995), mit dem Nova Laser von Cauble u. a. (1997), mit der Z-Maschine von Knudson u. a. (2001) und mit Sprengstoff von Belov u. a. (2002). Bei sehr niedrigen Temperaturen wurden die Drücke mit statischen Diamantstempeln von Mao und Hemley (1994) bestimmt.

fachstoßexperimenten wurde im späteren Stadium des Experiments eine weitere Kompression gesehen. Sie entsteht, wenn die Stoßfront das Ende der Probenkammer erreicht. Dort entsteht eine neue Stoßfront in umgekehrter Richtung. So wird eine Stoßfront zwischen der Probenkammer und der komprimierenden Platte hin und her reflektiert. In diesem Sinne handelt es sich um eine Verkettung von Einfachstößen mit den Endgrößen der vorherigen Kompression als Anfangsgrößen. Bei hohen Dichten kann diese Art von Kompression als isentrop betrachtet werden. Der Dichtezuwachs läuft in kleinen Schritten. Eine Isentrope ist dafür eine sehr gute Näherung. Ein besonderes Phänomen bei Mehrfachkompressionen ist das gelegentliche Sinken der Temperatur. Dies ist eine Eigenschaft von Druckdissoziierenden und -ionisierenden Materialien.

Mit Mehrfachstoßexperimenten konnten Holmes u. a. (1995); Nellis u. a. (1999) Drücke über 1 Mbar erreichen, wie in Abbildung 2.7 zu sehen ist. Ein Defizit der meisten Experimente ist die ausschließliche Bestimmung von Temperatur und Druck. Selten wurde beides gemeinsam bestimmt ähnlich wie bei Cauble u. a. (2000). Die jeweilige fehlende andere Größe wird mit Hilfe einer Zustandsgleichung berechnet. So kann bei den Mehrfachstoßexperimenten von Mostovych u. a. (2000) nicht mit dem ursprünglichen Experiment verglichen werden, sondern nur mit den aus dem Linear-Mixing Modell von Ross (1998) berechneten Drücken.

Eine neue Variante stellt die Vorkomprimierung mit Diamantstempeln von Loubeyre u. a. (2003) dar. Dabei wird ein Ausgangszustand mit hoher Dichte und hohem Druck bei niedriger Temperatur erreicht. Bei der anschließenden Stoßkomprimierung können so noch höhere Dichten erzielt werden.

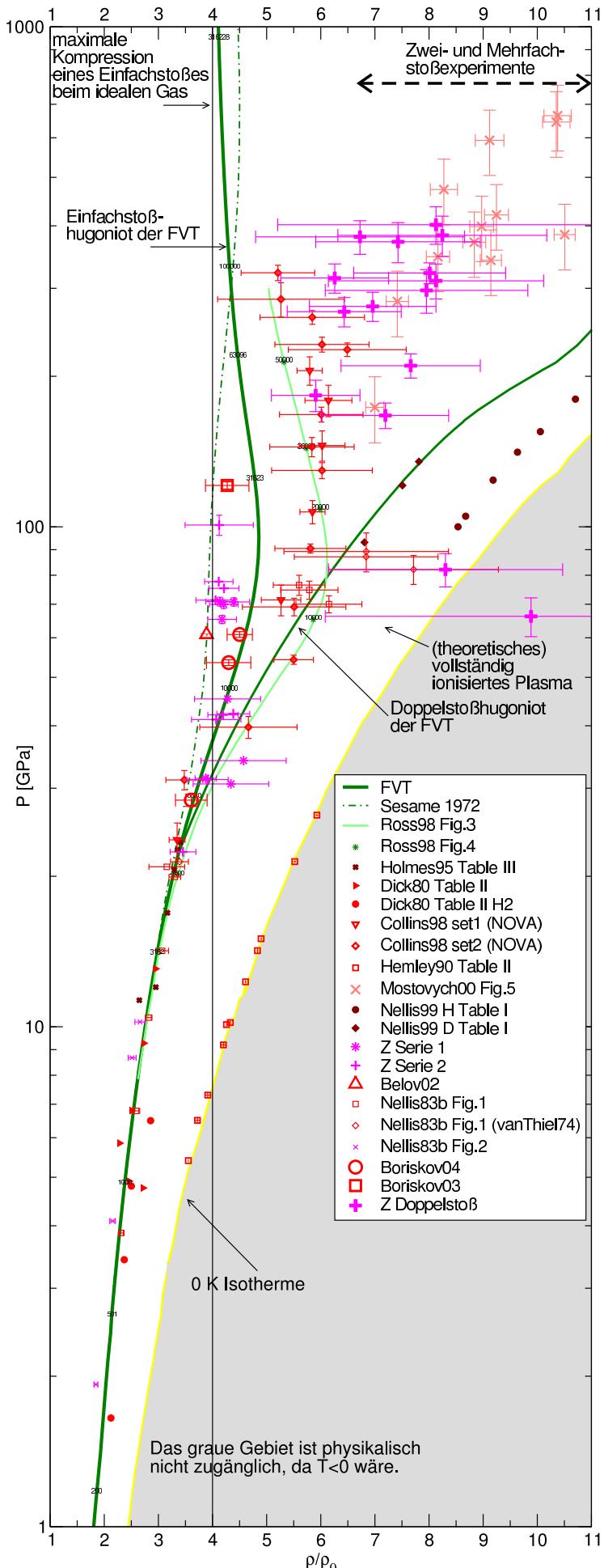


Abbildung 2.8: Übersicht über die Experimente mit Wasserstoff unter hohen Drücken.

Einfachstoßexperimente

mit Gaskanonen:

▷ und ○ Dick und Kerley (1980),
mit Laser:

▽ und ◇ Collins u. a. (1998)

mit Z-Maschine:

* und + Knudson u. a. (2003)
mit Kugelsprengung:

Belov u. a. (2002)

Mehrfachstoßexperimente

mit Gaskanonen:

* Holmes u. a. (1995),
Nellis u. a. (1999)

mit Laser:

Mostovych u. a. (2000)

Diamantstempelexperimente

□ Hemley u. a. (1990),

Zur Orientierung geben wir hier drei chemische Modelle:

Fluid-Variational-Theory (Juranek und Redmer, 2000), Linear Mixing Modell (Ross, 1998) und Sesame (Kerley, 1972b)

Kapitel 3

Modelle

Modelle dienen dem Verständnis und der Voraussage. Im Fall von Wasserstoff zeigen sich bis heute in dem Bereich zwischen neutralem und vollständig ionisiertem Wasserstoff große Unterschiede nicht nur bei den Experimenten, wie sie in Kapitel 2 vorgestellt wurden, sondern auch bei den Modellen. Wir möchten hier die verschiedenen Modelle mit ihren besonderen Merkmalen und Unterschieden vorstellen. Darunter sind auch die hier weiterentwickelte Fluid Variational Theory (FVT) und die damit kombinierten Ausdrücke von Padénäherungen für das vollständig ionisierte Plasma, deren Umsetzung wir in den Kapiteln 4, 5 und 6 im Detail vorstellen. Dort vergleichen wir Experimente und Modelle auch quantitativ.

3.1 Physikalisches und chemisches Bild

Ziel aller Verfahren ist die Bestimmung der thermodynamischen Eigenschaften aus den Mikrozuständen. Ein Ansatz aus der Quantenmechanik ermöglicht die Bestimmung der freien Energie F :

$$F = k_B T \ln [Z] \text{ mit} \quad (3.1)$$

$$Z = \text{Spur}[e^{-\beta H}] \text{ als Zustandssumme} \quad (3.2)$$

Dabei ist H der Hamiltonoperator und die Spur die Summe über alle Diagonalelemente. Wird dabei F als Funktion des Volumens und der Temperatur ausgedrückt, erhalten wir ein thermodynamisches Potential, aus dem sich alle anderen thermodynamischen Eigenschaften berechnen lassen. Von der physikalischen Anschauung lässt sich der Hamiltonoperator leicht formulieren. Die Schwierigkeiten beginnen mit der Berechnung der Spur. Gängige Praxis ist, den Hamiltonoperator in einer Summe voneinander unabhängiger Operatoren zu vereinfachen:

$$F = k_B T \sum_i \ln [\text{Spur}[e^{-\beta H_i}]] \quad (3.3)$$

Die einzelnen Beiträge lassen sich separat behandeln. Versucht wird, den Hamiltonoperator in Teile zu zerlegen, deren Lösung bekannt ist. Die Lösungen sind unterschiedlicher Qualität

und in verschiedenen Parameterbereichen gültig. Verschiedene Ansätze für die Beiträge führen deshalb zu unterschiedlichen Ergebnissen. Im den folgenden Abschnitten stellen wir die Ansätze vor, die für Wasserstoff benutzt worden sind.

Im physikalischen Bild wird von den kleinsten problemrelevanten Teilchen ausgegangen, aus denen sich Wasserstoff zusammensetzt. Der Hamiltonoperator H besteht dann im nicht relativistischen Fall lediglich aus dem Anteil der kinetischen Energie mit den Impulsen p_k und den Coulombwechselwirkungen der Elektronen e und Ionen i mit der jeweiligen reduzierten Elementarladung ε_k und dem Abstand r :

$$H = \sum_{k=\text{alle e,i}} \frac{p_k^2}{2m_k} + \sum_{k'>k} \frac{\varepsilon_k \varepsilon_{k'}}{r} \quad (3.4)$$

Auf die Ebene der Nuklearteilchen wie Quarks und Gluonen gehen wir nicht. Diese spielen genauso wie relativistische Ausdrücke erst bei um Größenordnungen höheren Energien eine Rolle.

Bisher wurde hier in verschiedenen Simulationen (Militzer, 2000; Knaup u. a., 2001; Collins u. a., 2001) von Protonen und Elektronen als kleinste Teilchen ausgegangen. Daraus können verschiedene Bindungszustände entstehen. Bekannt ist das Atom und Molekül. Aber auch andere Gebilde wie Ketten aus mehreren Atomen und den entsprechenden dazugehörigen Ionen werden theoretisch vermutet (Kitamura u. a., 2000). Auch wenige Experimente legen dieses nahe. Andererseits gibt es Argumente, solch weitere Gebilde vernachlässigen zu können (z.B. Ross, 1998), da diese nur bei Bandstrukturrechnungen bei niedrigen Temperaturen auftraten.

Im Gegensatz dazu werden im chemischen Bild vorkommende Gebilde als Ganzes berücksichtigt. Die Wahl dieser Gebilde schränkt die Modellvorstellung auf diese ein und vernachlässigt andere eventuell mögliche. Der hier gewählte Ansatz beschränkt sich auf Atome, Moleküle und - dann natürlich nicht gebundene - Elektronen und Protonen.

Wir gingen in verschiedenen Stufen vor, Wasserstoff zu beschreiben:

- FVT I: Nur Moleküle (Juranek, 1998)
- FVT II: Atome und Moleküle (Nagel u. a., 1998; Lenosky u. a., 1999; Juranek u. a., 1999; Juranek und Redmer, 2000)
- FVT III: Atome und Moleküle unter Berücksichtigung verbesserter Ausdrücke für die Wechselwirkungen und der Effekt der Nichtadditivität (Juranek u. a. (2002) und diese Arbeit)
- Padé: Behandlung eines Elektron- Protonsystems mit Hilfe von Padénäherungen. (Juranek u. a. (2001) und diese Arbeit)
- FVT & Padé: Elektronen, Protonen, Atome, Moleküle als Kombination aus FVT und Padénäherungen. (Beule u. a. (1999b,a, 2000); Redmer u. a. (2000); Beule u. a. (2001); Tahir u. a. (2001a,b, 2003a,b) und diese Arbeit)

- FVT & Idealbeiträge der Elektronen und Protonen in Verbindung mit einer dichteabhängigen elektronischen Zustandssumme der Atome (diese Arbeit)

Überprüft wurden die einzelnen Modelle mit bereits vorhandenen Rechnungen. So konnte die FVT I mit den Rechnungen von [Ross u. a. \(1983\)](#) abgeglichen werden. Die FVT II und die FVT III wurde mit den Monte Carlo Simulationen von [Bunker u. a. \(1997a,b, 1998\)](#) abgeglichen. Alle anderen Weiterentwicklungen ließen sich nicht mit Modellen überprüfen, die vom Ansatz her das gleiche Ergebnis liefern müssen. Sie müssen sich mit den Experimenten messen.

3.2 Ursprung der FVT

Das Prinzip der Fluid Variational Theory (FVT) beruht auf der lange bekannten Gibbs-Bogolyubov Ungleichung $F \leq F_0 + \langle \phi - \phi_0 \rangle_0$, die von [Ross \(1987\)](#) in Anwendung auf Wasserstoff ausführlich beschrieben ist. Anfangs wurde sie überwiegend im Festkörperbereich angewandt. Einige Arbeiten wandten sie schließlich erfolgreich auf Fluide an ([Mansoori und Canfield, 1969](#)). Daraus ergibt sich der Name Fluid Variational Theory. In den 1980ern wurde sie speziell für Wasserstoff benutzt: Zum Beispiel wurde sie von [Ross u. a. \(1983\)](#) und [Saumon u. a. \(1989\)](#) verwendet.

In der FVT wird ein gut bekanntes Referenzsystem benutzt. In der Ungleichung sind die Größen mit Index 0 Größen des Referenzsystems. Ein gut bekanntes und einfaches System von Fluiden ist das System harter Kugeln. So ist dafür die freie Energie F_0 bekannt. Das Potential ϕ_0 ist überall Null außer in dem Bereich, wo die Paarkorrelationsfunktion Null ist - nämlich für Kugelabstände kleiner als deren Durchmesser. Deshalb kann in der FVT direkt das Potential ϕ des zu berechnenden Systems verwendet werden. Die Wichtung $\langle \rangle_0$ des Potentials geschieht über die Summation aller Teilchenabstände des Referenzsystems in Form einer Integration $\int_0^\infty r^2 \phi[r] g_0[r] dr$. Dabei werden mit der Paarkorrelationsfunktion g_0 die Abstände gewichtet. Auf diese Weise wurde die sehr aufwändig zu lösende Ornstein-Zernicke Gleichung umgangen, die zu einem gegebenen Potential die Paarkorrelationsfunktion bestimmt.

Mit der FVT werden die Ideal- und Wechselwirkungsbeiträge, wie wir sehen werden, sehr gut beschrieben. Besondere Eigenschaften der einzelnen Teilchen, wie Rotation, Vibration oder Spin, ergänzen die freie Energie des Systems um ihre Beiträge unabhängig von der FVT. Würden sich die zusätzlichen Eigenschaften zusammen mit den Wechselwirkungen gegenseitig stark beeinflussen, ließe sich dieses so nicht behandeln.

3.3 Ursprung der Padénäherungen

Padénäherungen sind nichts weiter als Polynome der Form $P[x] = \frac{a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n}{b_0 + b_1 x + \dots + b_m x^m}$. Sie interpolieren zwischen bekannten Ausdrücken, die für unterschiedliche Bereiche gültig sind. Sie werden mit Hilfe dieser Ausdrücke konstruiert. Konstruktionsvorschriften finden sich bei [Brezinski \(1991\)](#); [Barker und Henderson \(1976\)](#). Für die hier benötigte Anwendung

bestehen bekannte Ausdrücke für den Niederdichte und - temperaturbereich und für den Hochdichte- und Hochtemperaturbereich. Dieses sind die nach [Debye und Hückel \(1923\)](#) und [Gell-Mann und Brueckner \(1957\)](#) benannten Grenzfälle. [Richert \(1982\); Ebeling und Richert \(1982\)](#) wendeten auf diese Grenzfälle Padénäherungen zur Beschreibung von Plasmen über den gesamten Dichte- und Temperaturbereich an. Diese Padénäherungen wurden in [Ebeling und Richert \(1985\); Ebeling u. a. \(1988, 1999\); Stolzmann und Blöcker \(2000\)](#) untersucht und weiterentwickelt. Entscheidend für eine gute Padénäherung ist das Verhalten im Interpolationsbereich. Um dieses zu verbessern, wurden sukzessive Simulationsergebnisse berücksichtigt, die dann von den Padénäherungen im Interpolationsbereich durch verbesserte Konstruktionen wie bei [Stolzmann und Blöcker \(2000\)](#) erfüllt werden.

Damit entstand eine universell gültige Zustandsgleichung, die für den gesamten Dichte und Temperaturbereich hervorragende Ergebnisse liefert. Allerdings treten in einem relativ kleinen Dichte- und Temperaturbereich gebundene Zustände auf, die von den Padénäherungen in keiner physikalisch sinnvollen Weise beschrieben werden und auch nicht werden sollen. Dies spiegelt sich im Auftreten negativer Drücke wieder. Deshalb wurden für diesen Bereich separat Beschreibungen für gebundene Teilchen wie das Wasserstoffatom und -molekül benutzt. Darunter ist die FVT, die im Bereich ohne Vorkommen von freien Elektronen und Protonen hervorragende Ergebnisse liefert. Von [Beule u. a. \(1999b,a, 2000, 2001\)](#) wurden die Padénäherungen mit den Ergebnissen der FVT kombiniert. Eine Besonderheit dieser Konstruktion ist das Auftreten eines Plasmaphasenüberganges.

Es liegen somit zwei Beschreibungen für zwei unterschiedliche Bereiche vor: Die Padénäherungen für freie Elektronen und Protonen und die FVT für Wasserstoffatome und -moleküle. Jetzt galt es, den Übergangsbereich zwischen beiden Beschreibungen zu modellieren. Dieses wird in Kapitel 6 behandelt. Dazu wurde das chemische Gleichgewicht zwischen $e + p \rightleftharpoons H \rightleftharpoons H_2$ aufgestellt. Man spricht in diesem Fall von Padénäherungen im **chemischen Bild** (kurz PACH). Im Gegensatz dazu müssten die Padénäherungen im **physikalischen Bild** die Bindungszustände aus Elektronen und Protonen in den einzelnen Termen für Elektronen und Protonen wiedergeben.

3.4 Andere Modelle

Gegenwärtig werden im Bereich der Mbar Drücke und Temperaturen im eV Bereich auch verschiedene andere Modelle entwickelt, um die Resultate der Stoßexperimente zu beschreiben. In diesem Abschnitt gehen wir auf die einzelnen Modelle ein und beschreiben deren Unterschiede.

3.4.1 Entwicklungen

Hier geht es um Entwicklungen der Zustandsgleichung. Gegenüber Simulationen liefern sie aufgrund der analytischen Ausdrücke schneller ein Ergebnis. Die einzelnen Terme lassen sich häufig mit einfachen Vorstellungen verbinden.

ACTEX - Aktivitätsentwicklung

Die Abkürzung ACTEX steht für die englische Bezeichnung activity expansion. Die Zustandsgleichung wird nach den Aktivitäten $z_k = (2s_k + 1)\Lambda_k^{-3} \exp[\mu_k/(k_B T)]$ entwickelt, die indirekt eine Entwicklung nach dem chemischen Potential im großkanonischen Bild darstellen. $\Lambda_k = \sqrt{\frac{2\pi}{m_e k_B T}} \hbar$ ist die de Broglie Wellenlänge für das Elektron ($k=e$) und das Proton ($k=p$). Das chemische Potential μ_k ist jedoch nicht direkt messbar. Deshalb ist diese Methode für den praktischen Gebrauch umständlich. Wünschenswert sind immer Zustandsgleichungen, die von messbaren Größen abhängen. Diese Methode führt zu guten Ergebnissen für große Temperaturen und Dichten. In [Rogers \(2000\)](#) wurde eine solche Entwicklung durch Hinzunahme weiterer Entwicklungskoeffizienten verfeinert. Darin werden inzwischen auch interessante Ergebnisse bei kleineren Dichten und Temperaturen präsentiert. Zu tiefen Temperaturen hin divergiert die Planck-Brillouin-Larkin-Zustandssumme. Sie wird in den chemischen Modellen als elektronische Zustandssumme für die Atome verwendet. Bei ACTEX konnte sie jetzt identifiziert werden. Sie erscheint dort in einer Darstellung, die bei kleinen Temperaturen die Quantennatur berücksichtigt und dort deshalb nicht mehr divergiert. Nur zeigt [Rogers \(2000\)](#) für entsprechend niedrige Temperaturen keine Ergebnisse. In [Rogers \(2000\)](#) wird zwar die gute Übereinstimmung der Drücke und inneren Energien mit der PIMC - Methode ([Militzer und Ceperley, 2000](#)) betont. Dies trifft jedoch im Vergleich zu den Stoßexperimenten nur für sehr große Temperaturen weit oberhalb von 5×10^4 K zu. Im Gegensatz zu PIMC reproduziert ACTEX teilweise die sehr viel größere Kompression von Wasserstoff bei den Nova Experimenten. Möglicherweise könnte die Hinzunahme weiterer Entwicklungskoeffizienten zu einem aussagekräftigen Ergebnis führen.

Sesame - Standard Zustandsgleichung aus Los Alamos

Das Los Alamos National Laboratory (LANL) begann Anfang der 1970er Zustandsdatentabellen für möglichst viele Materialien zusammenzustellen. Die Datenbank erhielt den Namen Sesame. In ihr sind auch die Materialien Wasserstoff und Deuterium enthalten. Zur Berechnung der Zustandsdaten für Wasserstoff und Deuterium wurde die von [Kerley \(1971, 1972b,a\)](#) entwickelten Zustandsgleichungen benutzt. Die gute Kurzübersicht des Modells von [Kerley \(2003\)](#) beinhaltet die jüngsten Erweiterungen und Neuerungen aus [Dick und Kerley \(1980\); Kerley \(1980, 1983\)](#).

Sesame ist ein chemisches Modell. Sowohl für molekularen und atomaren festen Wasserstoff als auch für molekulares und atomares Fluid werden Zustandsgleichungen aufgestellt. Für den festen Aggregatzustand wurden Ansätze aus der Festkörpertheorie benutzt. Der dafür nötige Dichte- und Temperaturbereich ist nicht Gegenstand dieser Arbeit. Von Interesse ist der Ansatz für das Fluid. Er besitzt sehr viel Ähnlichkeit mit der hier benutzten FVT. Wir legen deshalb die Unterschiede dar.

- Als Wechselwirkungspotential wird das für die 0 K-Kurve benutzt. Es entspricht in etwa sogar dem Exponential-6-Potential in der FVT: Es ist ein Exponential-7,5-Potential.

- Wie in der FVT wird auch hier die freie Energie über harte Kugeldurchmesser minimiert.
- Weil keine effektiven Paarpotentiale verwendet werden, wird die freie Energie um Quantenkorrekturen von Rosenfeld (1980b,a) und höhere Ordnungen der Entwicklung ergänzt.
- Der Zustand Atom beinhaltet auch ionisierte Atome als energetischen Zustand in der Zustandssumme. Eine Unterscheidung zwischen Atom und Ion entfällt.
- Die Rotations- und Vibrationsterme berücksichtigen Dichteefekte bei hohen Dichten.
- Das Mischungsverhältnis wird nicht über chemische Potentiale abgeglichen, sondern mit Hilfe des Prinzips linear zu mischen. Dabei wird für alle Komponenten eine Partialdichte gewählt, bei der ihre Drücke übereinstimmen. Die Partialdrücke werden mit Hilfe der Partialdichten umskaliert.

Kerley (2003) zeigt die Bedeutung der dichteabhängigen Rotations- und Vibrationsterme für die Stoßexperimente. Eine stärkere maximale Kompression wie bei der FVT wird wegen der Dichteabhängigkeit nicht erreicht. Die Anwendung des linearen Mischungsprinzips vermeidet, eine Zustandsgleichung aufzustellen zu müssen, die in sich konsistent ist, also sowohl die Bedingungen für den Druck und das chemische Potential erfüllt. Die Thermodynamik für die Mischung wird hier über die Drücke definiert.

Sesame zeigt eine hervorragende Übereinstimmung mit den PIMC Rechnungen und den Stoßexperimenten der Z-Maschine (Knudson u. a., 2003). Die Autoren beider Modelle zweifeln die Nova Daten (Da Silva u. a., 1997) an, die eine wesentlich stärkere Kompression zeigen als die Z-Maschinen Daten.

LM - Lineares Mischen

Bereits in Ross und Radousky (1989) wurde ein chemisches Modell aufgestellt, das später mit den Experimenten des Nova Lasers (Da Silva u. a., 1997) übereinstimmen sollte. Die Besonderheit liegt in der Art und Weise, wie die freie Energie bestimmt wird: Über die lineare Addition der Einzelkomponenten. Deshalb erhielt dieses Modell den Namen Linear Mixing Modell. Vereinfachend werden nur zwei mögliche Komponenten angenommen: Moleküle und metallischer Wasserstoff, wobei metallischer Wasserstoff nichts anderes als Protonen und Elektronen sind. In diesem Fall wurde jedoch nur die komplette Zustandssumme eines Wasserstoffatoms benutzt inklusive der Zustände für ein freies Elektron. Die freie Energie F setzt sich folglich aus dem molekularen Anteil F_{mol} und dem metallischen Anteil F_{met} zusammen:

$$F = (1-x)F_{mol} + xF_{met} - TS_{mix} \quad (3.5)$$

$$S_{mix} = k_B ((1-x)\ln[(1-x)/(1+x)] + 2x\ln[2x/(1+x)]) \quad (3.6)$$

Dabei ist x das Massenverhältnis. Die freie Energie wird nun nach x minimiert. Dieses lässt sich einfach umsetzen, da die Einzelanteile F_{mol} und F_{met} vereinfachend lediglich von

der Gesamtmasse abhängen. Dadurch verhalten sich Druck und innere Energie genauso additiv. Genau hier liegt der erste wesentliche Unterschied zu dem in dieser Arbeit vorgestellten Modell. Wir berücksichtigen die Partialdichten und müssen deshalb zusätzlich die Wechselwirkungen zwischen den unterschiedlichen Sorten berücksichtigen. Der zweite wesentliche Unterschied ist die Behandlung der Sorten, bei denen wir zwischen atomarem Wasserstoff und vollständig ionisiertem Wasserstoff unterscheiden. Wir berücksichtigen damit eine weitere chemische Reaktion.

In Ross (1998) wird das LM-Modell mit den Experimenten verglichen und mit ihnen besser abgestimmt. Das LM Modell fand auch Anwendung zur Auswertung der Stoßexperimente mit dem Nike Laser des Naval Research Laboratory in Washington (Mostovych u. a., 2000, 2001a,b). Das Modell steht jedem für eigene Berechnungen als Mathematica Programm in Bates (2003) zur Verfügung.

Nachdem alle Versuche scheiterten, mit Hilfe von physikalischen (Simulations-) Modellen die höhere Kompression bei Wasserstoff zu beschreiben, versuchten Ross und Yang (2001) zu erklären, was das Problem einiger Simulationen ist: Die Dichte-Funktional-Theorie (DFT) soll die Dichte des metallischen Wasserstoffs unterschätzen. Kurze Zeit später stellten die Experimente von Knudson u.a. (2003) mit der Z-Maschine die Nova und Nike Laserexperimente und das LM Modell in Frage. Dies erfordert, die Argumentationen aus Ross und Yang (2001) neu zu überdenken, denn zu den handfesten Argumenten, dass die Simulationen die Metallisierung unterschätzen soll, müsste es ein weiteres Defizit geben, das dieses kompensiert.

Weitere chemische Modelle

In Haronska u. a. (1987) wird ein harte Kugel System zur Beschreibung von Atomen und Molekülen kombiniert mit Padénäherungen für Elektronen und Protonen. Bereits dieses einfache Modell weist Phänomene auf, die weit aufwändigere chemische Modelle auch zeigen:

- Es gibt eine ausgeprägte Druckdissoziation und -ionisation um $0,5 \text{ mol/cm}^3$.
- Bis zu einer Temperatur von 16.500 K gibt es einen Plasmaphasenübergang um $0,4 \text{ mol/cm}^3$.

Bei diesem Modell ist das harte Kugelsystem mit festen Durchmessern für die Atome und Moleküle von Vorteil. Es ist zwar die Rede von effektiven Durchmessern, die aber nur den Zweck haben, die Wechselwirkung zwischen unterschiedlichen Sorten indirekt mit einzubeziehen. Mit den festen Durchmessern kommen beim reduzierten Volumenkonzept für die Elektronen und Protonen große Beiträge für das chemische Potential der Atome und Moleküle hinzu. Dieses fördert eine ausgeprägte Druckionisation. Modelle mit realistischeren Wechselwirkungen zwischen den Neutralteilchen wie bei dem in dieser Arbeit entwickelten Modell lassen genau dieses vermissen. Dies erfordert in dem in dieser Arbeit entwickelten Modell eine dichteabhängige atomare elektronische Zustandssumme. Der Plasmaphasenübergang ergibt sich aus der Art der Padénäherungen, die bei Temperaturen unterhalb

16.500 K für das reine Elektron-Proton-Plasma bereits einen Phasenübergang enthalten - bei noch niedrigeren Temperaturen sogar mit negativen Druckbeiträgen.

Schlange und Kremp (1982) versuchten die freie Energie für ein Molekül über die Berechnung des vierten Clusterkoeffizienten zu erhalten. Dieses wurde dann mit den freien Energien der Atome, Elektronen und Protonen kombiniert. Darüber ließen sich Zusammensetzungen ausrechnen, die jedoch keine Druckdissoziation und -ionisation enthielten. Nach unserem Verständnis liegt dieses am Fehlen von geeigneten Wechselwirkungstermen zwischen den Teilchen.

Das in Saumon und Chabrier (1989); Saumon u. a. (1989); Saumon und Chabrier (1991, 1992) entwickelte Modell kommt dem Modell dieser Arbeit am nächsten. Die Wechselwirkungen zwischen den Neutralteilchen werden mit effektiven Wechselwirkungspotentialen beschrieben. Das Plasma wird als Einkomponentenplasma beschrieben. Es wird hier zwischen den Komponenten nicht linear gemischt, sondern auch jede einzelne Partialdichte betrachtet. Die Wechselwirkung zwischen den Neutralteilchen und dem Plasma geschieht über ein Polarisationspotential der Atome. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu dem Modell dieser Arbeit: Bei großen Dichten ist dieses Potential vernachlässigbar. Die Wechselwirkung geschieht in dem Modell dieser Arbeit über das reduzierte Volumenkonzept und schliesslich über eine dichteabhängige Zustandssumme der Atome.

3.4.2 Monte Carlo Simulationen

Monte Carlo (MC) Simulationen wenden physikalische Gesetzmäßigkeiten auf ein Vielteilchensystem an. Um für eine numerische Berechnung mittels Computer das Problem von endlos vielen Teilchen handhabbar zu machen, wird eine begrenzte Zahl von Teilchen in einer Box simuliert. Die Box wird im Ortsraum periodisch fortgesetzt. Auf diese Weise werden Oberflächeneffekte vermieden. Es gibt verschiedene Ansätze für die physikalischen Gesetzmäßigkeiten. In der klassischen MC Simulation wechselwirken die Teilchen z.B. über ihre Coulombkräfte. Man legt dann die Gesetze der klassischen Mechanik zu Grunde. Müssen die Teilchen quantenmechanisch behandelt werden, wird der Hamiltonoperator aufgestellt und Wahrscheinlichkeiten zur Versetzung der Teilchen berechnet. Hier gibt es wiederum verschiedene Berechnungsmethoden, die wir hier vorstellen.

PIMC - Pfadintegral Monte Carlo

Ziel ist die Berechnung des Dichteoperators $\rho = |\psi><\psi|$. Ist er bekannt, kann zu jeder Größe O des Systems der Erwartungswert $\langle O \rangle = \text{Spur}[O\rho]/\text{Spur}[\rho]$ berechnet werden. Im Hochtemperaturlimes lässt sich ρ exakt bestimmen. Mit Hilfe der Pfadintegrale wird ρ für niedrigere Temperaturen aus $\rho[T \rightarrow \infty]$ dargestellt. Dabei wird für eine Startkonfiguration R_0 im Ortsraum die Dichtematrix für eine Zielkonfiguration R_1 berechnet. Hier kommt dann die Monte Carlo Simulation ins Spiel. Für jeden Schritt der Simulation wird für eine mögliche Zielkonfiguration die Wahrscheinlichkeit berechnet. In Abhängigkeit von einem Zufallsgenerator wird die Zielkonfiguration angenommen oder verworfen.

Bei PIMC gibt es zwei zu überwindende Probleme:

- Die Zahl der Pfade muss eingeschränkt werden.
- Bei Fermionen werden große negative und positive Beiträge aufsummiert, die vom Betrag fast gleich sind.

Eine heute für dichte Wasserstoffplasmen benutzte Pfadintegral Monte Carlo Technik geht zurück auf Ceperley (1995). Dabei wurde die Zahl der Pfade über die Einführung von Knotenflächen begrenzt. Diese Technik wurde verfeinert und fand ihren vorläufigen Abschluss in Militzer (2000). Die Zahl möglicher Pfade wurde durch eine geschicktere Wahl der Knotenflächen weiter eingeschränkt. Dies führte zu einer besseren Übereinstimmung der Zustandsgleichung zu niedrigeren Temperaturen von 10.000 K. Bei den Stoßexperimenten stimmt PIMC mit Sesame und den Z-Maschinen Daten überein. In Militzer und Ceperley (2001); Militzer u. a. (2002); Militzer und Pollock (2003) wurden etliche zusätzliche PIMC-Datenpunkte für Wasserstoff berechnet. Inzwischen ist ein enges Datengitter entstanden.

Die Methode PIMC wird vom Prinzip her als exakt bezeichnet, weil sie den Hamiltonoperator für ein Elektron (e)-Proton (p)-System exakt benutzt ohne irgendwelche Näherungen oder Annahmen zu machen:

$$H = \sum_{i=\text{alle e,p}} p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=\text{alle e,p}} \frac{q_i q_j}{|r_i - r_j|} \quad (3.7)$$

$$q_i = \begin{cases} -\epsilon & \text{wenn } i=e \\ +\epsilon & \text{wenn } i=p \end{cases} \quad (3.8)$$

Eine weitere PIMC Simulation wird in Filinov u. a. (2001b,c,a); Filinov (2001); Filinov u. a. (2003) vorgestellt. Sie wird direkte Fermionenpfadintegral Monte Carlo Simulation genannt. Filinov u. a. (2003) stellt deutliche Abweichungen zur PIMC Simulation aus Militzer und Pollock (2000) fest. Sie verspricht sogar eine Erklärung für einen Phasenübergang, den einige chemische Modelle vorhersagen. Die Ergebnisse wurde in der Form einer Hugoniotkurve von Bezkrovnyi u. a. (2005) gezeigt, die weitgehend mit der FVT übereinstimmt.

Eine weitere PIMC von Kaxiras und Guo (1994) beschreibt festen molekularen Wasserstoff. Sie ist für die Stossexperimente von keinem Interesse, da dort zu hohe Temperaturen erreicht werden, bei denen es keinen festen Wasserstoff mehr gibt. Es gibt eine gute Übereinstimmung mit den DiamantstempelExperimenten aus Hemley u. a. (1990).

3.4.3 Molekulardynamik mit Dichte Funktional Theorie (DFT)

Bei der Molekulardynamik werden die Kräfte berechnet, die auf jedes einzelne Teilchen wirken. Die Kräfte ändern deren Geschwindigkeitsvektoren mit jedem Zeitschritt. Die Teilchen werden mit ihrer Geschwindigkeit bewegt. Dieses Verfahren funktioniert gut für klassische Teilchen. Treten im System Elektronen auf, bedarf es anderer Ansätze, die die Vertauschbarkeit berücksichtigen.

Die Quantenmolekuldynamik berücksichtigt über eine Dichtefunktionaltheorie (DFT) die Quantennatur der Elektronen. Die Ionen, also bei Wasserstoff die Protonen, wirken dabei wie ein äußeres Potential auf die Elektronen. In der DFT wird dieses Potential im Hamiltonoperator berücksichtigt. Die DFT entstand aus dem Lemma von Hohenberg und Kohn (1964), das Ansatzmöglichkeiten bietet, die freie Energie des Systems zu berechnen ohne die Wellenfunktionen oder Eigenwerte eines Hamiltonoperators bestimmen zu müssen. Übrig bleibt die Bestimmung der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit der DichteVerteilung $n(r)$. Hierfür gibt es unterschiedliche Ansätze, die Energie aus der DichteVerteilung zu berechnen. Zum Beispiel wurde die Tight Binding Methode von Collins u. a. (1995); Kwon u. a. (1994, 1996); Lenosky u. a. (1997, 1999) benutzt.

WPMD - Wellenpakets-Molekuldynamik

Die Wellenpakets-Molekuldynamik (WPMD) benutzt keine DFT. Statt scharf lokalisierter Teilchen wird die Unschärfe sowohl der Elektronen wie der Protonen über im Raum verschmierte Teilchen betrachtet. Diese repräsentieren letztendlich die in der Quantenmechanik üblichen Wellenfunktionen. Die verschmierten Teilchen werden mit Hilfe von Gauß-Funktionen dargestellt. Sie haben die günstige Eigenschaft, bei den vorkommenden Transformationen Gauß-Funktionen zu bleiben. So können diese analytisch berechnet werden. Allerdings werden die Gauß-Funktionen mit jedem Berechnungsschritt immer weiter über den Raum verschmiert. Am Ende wäre jedes Teilchen gleichmäßig über den Raum ausgedehnt. Die Kunst besteht unter anderem darin, die Verbreiterung des Gauß-Funktionen geschickt einzuschränken.

Die heute für dichte Wasserstoffplasmen verwendete Wellenpakets-Molekuldynamik geht zurück auf Klakow u. a. (1994a,b); Klakow (1994). Diese Technik wurde von Knaup u. a. (1999, 2001); Knaup (2001, 2003) weiterentwickelt, indem Schritt für Schritt alle Wellenfunktionen des Vielteilchensystems antisymmetrisiert wurden.

Kapitel 4

Neutrale Teilchen - FVT

In Kapitel 3 haben wir die unterschiedlichen Ansätze besprochen, um das Verhalten von Wasserstoff zu beschreiben. Die in Abschnitt 3.2 beschriebene Fluid Variational Theory (FVT) benutzen wir zur Beschreibung neutralen Wasserstoffs aus Atomen H und Molekülen H_2 . Hier erklären wir, wie wir die FVT im Detail umgesetzt haben. Ziel ist ein Ausdruck für die freie Energie, aus dem wir alle anderen Größen ableiten können.

Für die freie Energie f nur mit den neutralen Teilchensorten Atome und Moleküle setzen wir an:

$$f_0 = \frac{n_H}{n_0} f_H + \frac{n_{H_2}}{n_0} f_{H_2} + f_0^c. \quad (4.1)$$

Die ersten beiden Anteile f_H und f_{H_2} stehen für die Zustandssumme der isolierten Atome und Moleküle. Der letzte Anteil f_0^c steht für die Wechselwirkung zwischen den Atomen und Molekülen. Die Teilchendichten n geben die Anzahl des jeweiligen Teilchens pro Volumen an. Mit der Protonendichte $n_0 = n_H + 2n_{H_2}$ wird die freie Energie f proportional zur Masse und dem Volumen. Diese dann intensive Größe ist für die Minimierung der freien Energie entscheidend. Für die Wechselwirkungsterme kommt die FVT zur Anwendung. Alle Teile werden im folgenden nacheinander beschrieben. Die zugehörigen Konstanten werden im Anhang A.2 aufgelistet. Für Berechnungen mit Deuterium können sie durch die Deuteriumkonstanten im Anhang A.3 ersetzt werden.

4.1 Idealanteile und interne Zustandssumme

Wir behandeln die interne Zustandssumme unabhängig von den Wechselwirkungen. Dieses vereinfacht das System erheblich. In Kerley (1971) wurden z.B. die Vibrationsterme für das Molekül dichteabhängig behandelt. Darauf verzichten wir, weil dieses in einem Bereich zu tragen kommt, in dem wir bereits einen großen Anteil druckionisierter Atome vorfinden.

Die ideale freie Energie inklusive der internen Zustandssumme der atomaren und molekularen Anteile sind gegeben durch

$$f_H[n, T] = f_H^{id}[n, T] + f_H^{spin}[T] + f_H^{el}, \quad (4.2)$$

$$f_{H_2}[n, T] = f_{H_2}^{id}[n, T] + f_{H_2}^{rot}[T] + f_{H_2}^{vib}[T] - \frac{D_0}{k_B T} + f_{H_2}^{el}.$$

Idealteil

Die Beiträge der translatorischen Freiheitsgrade in der statistischen Physik lauten für die Atome H und Moleküle H_2 :

$$f_k^{id}[n, T] = \ln[\Lambda_k^3 n] - 1, \quad (4.3)$$

wobei $\Lambda_k^2 = 2\pi\hbar^2/(m_k k_B T)$ die thermische Wellenlänge ist und $k = H$ oder $k = H_2$ ist.

Spin des Atoms

Die zwei Spinstellungen des Atoms führen zu

$$f_H^{spin}[T] = -\ln 2. \quad (4.4)$$

Rotation und Vibration des Moleküls

Die Rotations- und Vibrationszustände des H_2 Moleküls lauten nach Mayer und Goeppert-Mayer (1948):

$$f_{H_2}^{rot}[T] \approx \ln[\sigma_{H_2}] - \sigma_{H_2}/3 - \sigma_{H_2}^2/90 \quad \text{und} \quad (4.5)$$

$$f_{H_2}^{vib}[T] = \ln [1 - e^{-u}] + \left(8a_0 + \frac{a_1 u}{e^u - 1} + 2x \left(\frac{u}{e^u - 1} \right)^2 \right) \frac{1}{u} \quad (4.6)$$

$$u = \frac{h\nu_{H_2}}{k_B T} \quad (4.7)$$

$$a_1 = 6\sqrt{a_0 x} - 6a_0 \quad (4.8)$$

$$a_0 = 0,0143 \quad (4.9)$$

$$x = 0,02736 \quad (4.10)$$

Die typische Rotationstemperatur des H_2 Moleküls ist $\sigma_{H_2} = \hbar^2/(m_H r_0^2 k_B T) = 87.58 \text{ K}/T$; die charakteristische Vibrationsfrequenz kann auch in Einheiten der Temperatur als $h\nu_{H_2}/k_B = 6338.2 \text{ K}$ gegeben werden. Die Werte für Wasserstoff und Deuterium haben wir Huber und Herzberg (1979) entnommen. Bei der Vibration nehmen wir die beiden nächst höheren Ordnungen mit. Mit ihnen erreichen wir ein chemisches Gleichgewicht zu Gunsten der Atome bei Temperaturen oberhalb 10.000 K wie Bezkrovniy u. a. (2004) gezeigt haben.

Dissoziation

D_0^* ist die Dissoziationsenergie des isolierten Wasserstoffmoleküls. Wir benutzen hier die effektive Dissoziationsenergie D_0 . Sie ist die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand

der Molekülvibration bis zur Kontinuumsgrenze, also dem Zustand freier Atome. Der Term für die Grundzustandsenergie $\frac{1}{2}h\nu_{H_2}$ entfällt daher beim Vibrationsterm.

$$D_0 = D_0^* - \frac{1}{2}h\nu_{H_2} \quad (4.11)$$

Häufig wird von einem Abschneiden der Dissoziationsenergie mit zunehmender Temperatur und Dichte gesprochen. Dieses wäre hier der Fall, wenn wir die Wechselwirkungsterme zu der Dissoziationsenergie hinzurechnen würden. Wir betrachten diese jedoch separat. Deshalb bleibt in diesem Modell die Dissoziationsenergie konstant.

Elektronische Zustandssumme

Weitere Zustände ergeben sich aus den elektronischen Zuständen des Atoms und des Moleküls. Hier steht die Zustandssumme eines isolierten Wasserstoffatoms bzw. -moleküls. Nur für die Behandlung eines neutralen Systems benötigen wir diese nicht. In diesem Fall gehen wir von $f_{H_2}^{el} = 2f_H^{el}$ aus. Damit fällt die elektronische Zustandssumme zur Beschreibung des neutralen Systems in guter Näherung heraus. Von Bedeutung ist sie weiterhin für das Gesamtsystem gemeinsam mit dem Plasma, um das chemische Gleichgewicht zwischen Atom, Elektron und Ion aufstellen zu können.

Hier berechnen wir die freie Energie mit der Planck (1925); Brillouin (1932); Larkin (1960) Zustandssumme:

$$\sigma_{PBL} = 4 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 \left(\exp \left[\frac{I_0}{s^2 k_B T} \right] - 1 - \frac{I_0}{s^2 k_B T} \right) \quad (4.12)$$

$$f_H^{el} = -\ln[\sigma_{PBL}] - \ln \left[\frac{2}{2e^{\alpha y} - 1} \right] \quad (4.13)$$

$$\alpha = 1,209 \quad (4.14)$$

$$y = \left(\frac{n_e \Lambda_e^3}{2} \right)^{2/3} = I_{1/2}^{2/3} \quad (4.15)$$

Den zweiten Anteil haben wir analog zu Kerley (1972b) eingeführt, um die Zahl der Zustände mit zunehmender Dichte n_e zu reduzieren. Solange wir keine Plasmen mit den freien Ladungsträgern berücksichtigen, entfällt der zweite Teil. Der erste Teil ist volumenunabhängig. Er ergibt deshalb keinen Beitrag zum Druck. Beim chemischen Potential entfällt er wegen obiger Annahme.

Berücksichtigen wir ein chemisches Gleichgewicht $H \rightleftharpoons e + p$ zwischen Atomen und Elektronen und Protonen, so trägt der zweite Term wesentlich zur Druckionisation bei. Bei niedrigen Dichten trägt er mit $-\ln[2]$ bei und ergibt den Spinbeitrag der Atome. Der Ausdruck aus Gleichung 4.1 darf dann im chemischen Potential nicht nochmals verwendet werden. Bei großen Dichten wird der Ausdruck zu $\alpha y = \alpha I_{1/2}^{2/3}$ mit dem Ziel, im Limes großen Dichten das chemische Potential der Elektronen bei kleinen atomaren Partialdichten zu erreichen, um das Auftreten eines großen Anteils von Atomen zu unterdrücken. f_H^{el} lässt sich nur zum Abgleich der chemischen Potentiale nutzen. Für andere Größen wie z.B.

den Druck findet er bei uns keine Verwendung, da er dort zu starken negativen Beiträgen führt. Da f_H^{el} nur für das chemische Potential verwendet wird, ist das partiell ionisierte Plasmamodell aus Kapitel 6 thermodynamisch inkonsistent.

4.2 Wechselwirkungsanteile - FVT

Der Wechselwirkungsanteil wird über die Gibbs (1902) - Bogolyubov (1970) - Ungleichung $F \leq F_0 + \langle \phi - \phi_0 \rangle_0$ bestimmt. Eine moderne allgemeine Herleitung führen Henderson (1974) und Deserno (2003, 2004) vor. In der Ungleichung ist die freie Energie F des realen Systems kleiner als die freie Energie F_0 des bekannten Referenzsystems zuzüglich des Mittelwerts der Differenz zwischen dem realen Paarpotential ϕ und dem Paarpotential des Referenzsystems ϕ_0 . Der Mittelwert wird über alle Zustände des Referenzsystems gebildet. Wir benutzen hierfür eine Zweikomponenten-harte-Kugel-Mischung. Die Zustände sind dann die Abstände zwischen den Teilchen, die mit der Paarkorrelationsfunktion der harten Kugeln gewichtet werden. Die freie Energie wird durch das Minimieren der rechten Seite obiger Ungleichung nach den Packungsdichten η_i oder den dazu äquivalenten Kugeldurchmessern der Komponenten erreicht. In Formeln lautet dies

$$\begin{aligned} f^c[n_0, T, \alpha] &\approx \min_{\eta_1, \eta_2} \{ f_{HK}[T, \alpha, \eta_1, \eta_2] + \alpha f_{HH}^c[\alpha n, \eta_1] \\ &+ 2\alpha(1-\alpha)f_{H_2 H_2}^c[n, \eta_1, \eta_2] + (1-\alpha)f_{H_2 H_2}^c[(1-\alpha)n, \eta_2] \} . \\ \alpha &= \frac{n_H}{n_H + n_{H_2}} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Der Ausdruck für die freie Energie eines Zweikomponenten-harte-Kugel-Systems wurde in Lebowitz (1964) abgeleitet und ist ausführlich ausgeschrieben in Mansoori u. a. (1971):

$$\begin{aligned} f_{HK}[T, \alpha, \eta_1, \eta_2] &= k_B T \left[\frac{3}{2}(1 + y_1 - y_2 - y_3) + \frac{3y_2 + 2y_3}{1 - \eta} \right. \\ &+ \left. (y_3 - 1) \ln(1 - \eta) + \frac{3(1 - y_1 - y_2 - y_3/3)}{2(1 - \eta)^2} - 4 \right], \end{aligned} \quad (4.17)$$

wobei

$$\eta = \eta_1 + \eta_2, \quad (4.18)$$

$$y_1 = (\eta_1^* + \eta_2^* - \eta_{12} - \eta_{21})/\eta,$$

$$y_2 = [\eta_1 \eta_2 + \eta_{21}(\eta_1 - 2\eta_2) + \eta_{12}(\eta_2 - 2\eta_1)]/\eta^2,$$

$$y_3 = \{(\alpha \eta_1^2)^{1/3} + [(1 - \alpha) \eta_2^2]^{1/3}\}^3/\eta^2,$$

$$\eta_{12} = (\eta_1^* \eta_2^*)^{1/3} \quad (4.19)$$

$$\eta_{21} = (\eta_2^* \eta_1^*)^{1/3},$$

$$\eta_1^* = (1 - \alpha)\eta_1 \quad (4.20)$$

$$\eta_2^* = \alpha\eta_2.$$

Bemerkenswert hierbei ist die reine Abhangigkeit des harten Kugelterms von der Packungsdichte und dem Sortenverhaltnis. Teilchendurchmesser und -dichten spielen keine Rolle, auch wenn dieses auf den ersten Blick in der Darstellung von Mansoori u. a. (1971) so aussieht.

Die Wechselwirkungsbeitrage f_{ij} sind durch Integrale uber die Paarpotentiale ϕ_{ij} und die zugehorigen Paarverteilungsfunktionen g_{ij} gegeben, welche durch eines harte Kugel Systems ersetzt und genahert werden.

$$\begin{aligned} f_{ii}[n] &= 12\eta \int_1^\infty x^2 \phi_{ii}[dx] g_{ii}[x] d^3x, \\ f_{12}[n] &= 12\eta_{mix} \int_1^\infty x^2 \phi_{12}[\bar{dx}] g_{12}[x, \bar{\eta}] dx, \end{aligned} \quad (4.21)$$

wobei das Integral ursprunglich ein 3-dimensionales Integral uber den ganzen Raum war. Uber die Winkelkoordinaten wurde bereits integriert; so verbleibt nur noch die Integration uber den dimensionslosen Radius $x = r/d_i$. Wir lassen die Integration ab 1 laufen, da in einem harte Kugel System fur Abstande kleiner als der Durchmesser die Paarkorrelation ohnehin Null ist. Die Durchmesser wahlen wir entsprechend allgemein auch fur die Wechselwirkung zwischen Atomen und Molekulen:

$$d = [6\eta/(\pi n)]^{1/3}, \quad (4.22)$$

$$\bar{d} = \frac{d_1 + d_2}{2} = [6\eta_{mix}/(\pi n)]^{1/3},$$

$$\eta_{mix} = \frac{n\pi d^3}{6} = \{(\eta_1/\alpha)^{1/3} + [\eta_2/(1-\alpha)]^{1/3}\}^3/8. \quad (4.23)$$

Die Paarkorrelationsfunktion $g(x)$ des harte Kugel Referenzsystems wird aus dem zugehorigen Strukturfaktor $S_{ij}[q, \eta]$ abgeleitet,

$$g_{ij}[x] = 1 + \frac{1}{12\pi\eta x} \int_0^\infty S_{ij}[q, \eta] q \sin[qx] dq. \quad (4.24)$$

Der Strukturfaktor steht uber eine Fouriertransformation in Beziehung mit der direkten Korrelationsfunktion $c_{ij}[q, \eta]$ uber

$$S_{kk}[q] = \frac{1 - n_k c_{kk}[q]}{D_d[q]}, \quad (4.25)$$

Wir verwenden die zum harte Kugelterm eines Mehrsortensystems gehorende Korrelationsfunktion. Der Ausdruck ist in Shimoji (1977) und hier in Gleichung B.6 gegeben.

4.2.1 Das Wechselwirkungspotential

Die effektiven Wechselwirkungspotentiale fur die Mischung aus Wasserstoffatomen und -molekulen werden durch Exponential-6-Potentiale genahert:

$$\phi_{ij}[r] = \begin{cases} \frac{\epsilon}{\alpha-6} \left\{ 6 \exp \left[\alpha \left(1 - \frac{r}{r_a} \right) \right] - \alpha \left(\frac{r_a}{r} \right)^6 \right\} & \text{fur } r > W \\ A \exp[-Br] & \text{fur } r \leq W \end{cases} \quad (4.26)$$

$$\phi_{ij}[W^-] = \phi_{ij}[W^+] \text{ und } \frac{\partial\phi_{ij}}{\partial r}[W^-] = \frac{\partial\phi_{ij}}{\partial r}[W^+] \text{ und } \frac{\partial^2\phi_{ij}}{(\partial r)^2}[W^+] = 0. \quad (4.27)$$

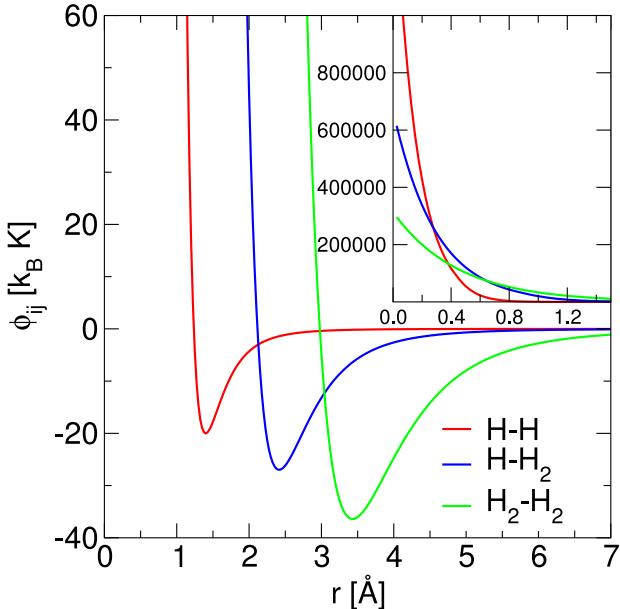


Abbildung 4.1: Effektive Wechselwirkungspotentiale. Die Farben rot, blau und grün gehören zu den Wechselwirkungen $H - H$, $H - H_2$ und $H_2 - H_2$. In dem Ausschnitt kleiner Abstände sind Fortsetzungen der Exponential-6 Potentiale als reine Exponentialfunktionen gezeigt.

Parameter	$H-H$	$H-H_2$	H_2-H_2
α	13.0	12.0125	11.1
$\epsilon [k_B \text{ K}]$	20.0	26.9815	36.4
$r_a [\text{\AA}]$	1.4	2.415	3.43
$W [\text{\AA}]$	0.411242	0.856638	1.45855
$A [k_B \text{ K}]$	1551840	670134	313369
$B [\text{\AA}^{-1}]$	6.46462	3.42833	2.24478

Tabelle 4.1: In der Tabelle sind die Parameter des effektiven Potentials aus Gleichung (4.26) für die Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen gegeben. Die in fett gedruckten Parameter sind vorgegeben. Die anderen ergeben sich daraus.

Der weitreichende anziehende Ast stimmt mit dem eines Lennard-Jones Potentials überein. Im Gegensatz dazu ist der abstoßende Ast durch eine Exponentialfunktion modelliert. In der Grenze $r \rightarrow 0$ wird das Exponential-6-Potential wieder anziehend. Dieses unphysikalische Verhalten wird vermieden, indem das Exponential-6-Potential durch eine reine Exponentialfunktion der Form $\phi_{ij}(r) = A \exp(-Br)$ ab dem Wendepunkt W für Abstände $r \leq W$ so ersetzt wird, dass die Abstoßung erhalten bleibt. Die Parameter A und B werden entsprechend einem kontinuierlichen Übergang gewählt. Ihre Parameter lassen sich berechnen. Ergänzend sind sie in Tabelle 4.1 gegeben zusammen mit den weiteren Werten für ϵ , α , und r_a .

Das H_2-H_2 Potential ist gut bekannt. Es wurde von [Ross u. a. \(1983\)](#) an die Stoßwellendaten angepasst, die bis zu 10 GPa gut reproduziert werden. [Kerley \(1983\)](#) zeigte eine gute Übereinstimmung der aus drei Parametern bestehenden Exponential-6 Potentiale mit Potentialen, die aus 15 Parametern angepasst wurden. Das $H-H$ Potential basiert

auf einem Vorschlag von Ree (1988) und das H-H₂ Potential folgt aus der Berthelotschen Mischungsregel (Henderson und Leonard, 1971).

Die Benutzung dieser effektiven Paarpotentiale schränkt die Gültigkeit der FVT auf Gebiete ein, in denen der harte Kugel Durchmesser nicht zu klein wird, da bei kleinen Abständen das effektive H-H Potential stärker abstoßend wird als das des Moleküls. Dies kann dem Ausschnitt aus Abbildung 4.1 entnommen werden. Kleine Abstände treten bei sehr großen Temperaturen und Dichten auf. Sie führen zu einem unsystematischen Verhalten der Druckdissoziation, wie es im Abschnitt 4.3.2 beschrieben wird. Im Zusammenspiel mit Druckionisation kommt dieser Bereich nicht zum Tragen. Deshalb wählen wir hier keine andere Fortsetzung. Ohnehin müsste das effektive Wechselwirkungspotential bei diesen kleinen Abständen in Frage gestellt werden.

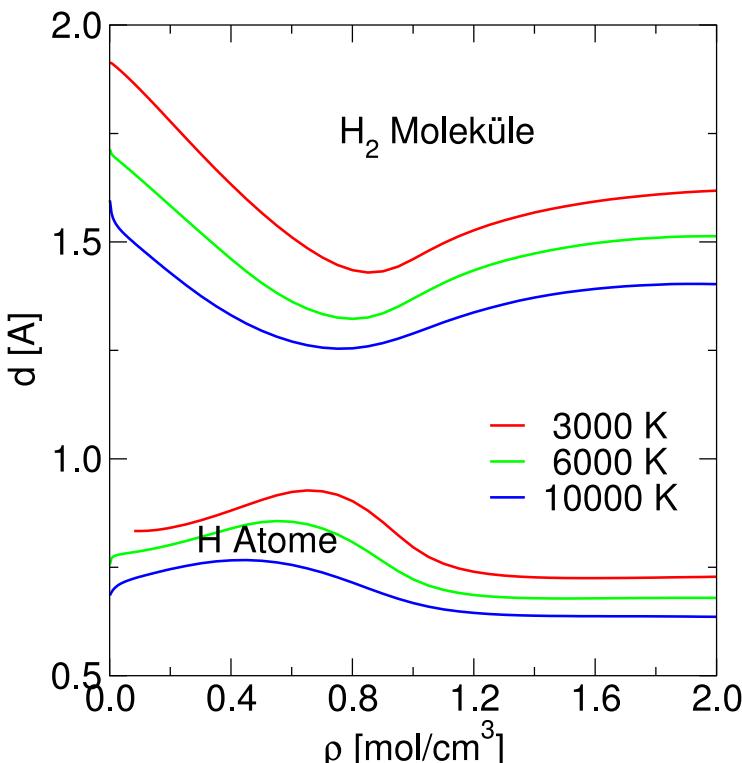


Abbildung 4.2: Harte Kugel Durchmesser für drei verschiedene Temperaturen. Mit zunehmender Temperatur wird der Durchmesser kleiner. Die drei oberen Kurven stellen den Moleküldurchmesser dar und die drei unteren den Atomdurchmesser.

In der FVT sind die Packungsdichten oder die dazu gleichwertigen harten Kugeldurchmesser die Minimierungsparameter. Wir haben diese in Abbildung 4.2 dargestellt für verschiedene Dichten und Temperaturen jeweils im chemischen Gleichgewicht, das in 4.3.1 behandelt wird. Im Bereich der Druckdissoziation wird das systematische Verhalten abnehmender Durchmesser mit zunehmender Dichte gestört.

4.3 Ergebnisse der FVT

In den beiden vorangehenden Abschnitten haben wir alle Anteile der freien Energie vorgestellt. Über die thermodynamischen Relationen können wir aus der freien Energie als

thermodynamisches Potential alle thermodynamischen Größen wie Druck, innere Energie, chemisches Potential, spezifische Wärmekapazität usw. für Wasserstoff, bestehend nur aus den Teilchen Atom und Molekül, berechnen. Das chemische Potential ist noch ein Sonderfall: Atome und Moleküle sollen sich im chemischen Gleichgewicht befinden. Diese Annahme begründen die Experimente und Überlegungen, die die Zeit abschätzen, innerhalb der sich ein Gleichgewicht einstellt (z.B. Knudson u. a., 2004). Die Kompression hält einige ns an. In dieser Zeit haben die Teilchen bereits einige 1000 Stöße hinter sich. Allenfalls in der Stoßfront selbst müsste ein Nichtgleichgewicht zu finden sein, das sich bisher bei den Auswertungen von Stoßexperimenten als nicht relevant erwiesen hat.

4.3.1 Chemisches Gleichgewicht

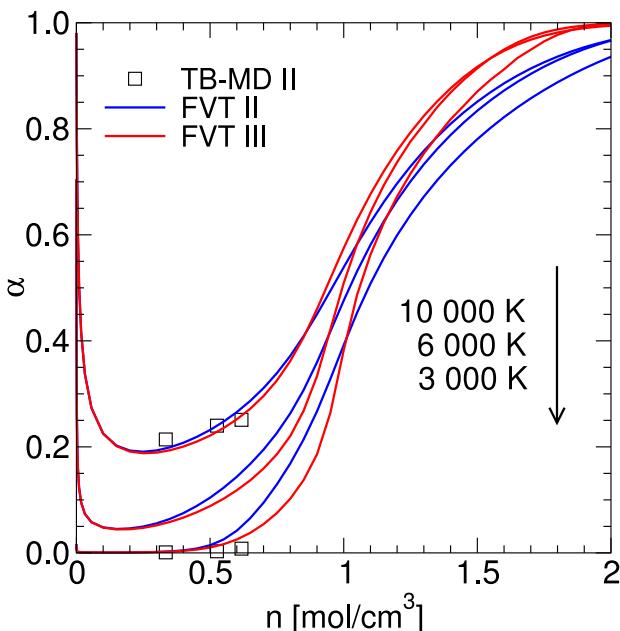


Abbildung 4.3: Dissoziationsgrad α des flüssigen Wasserstoffs als Funktion der Dichte für verschiedene Temperaturen. Rote Linien: FVT III, blaue Linien: FVT II. Für 10000 K und 300 K sind die Ergebnisse der Tight-binding Molekulardynamik Rechnungen von (Lenosky u. a., 1999) dargestellt.

Für das chemische Gleichgewicht der Reaktion $H + H \rightleftharpoons H_2$ lösen wir die Gleichung

$$2g_H = g_{H_2} \quad (4.28)$$

Das Lösen dieser Gleichung ist äquivalent mit der Minimierung der freien Energie F nach dem Teilchenverhältnis zwischen Atomen und Molekülen bei vorgegebener Gesamtmasse und Temperatur. Durch Minimierung von f nach dem Dissoziationsgrad wird das chemische Gleichgewicht berechnet.

Häufig wird die Gleichung 4.28 in das Massenwirkungsgesetz umgeschrieben in

$$n_{H_2} = \frac{n_H^2 \Lambda_H^3}{\sqrt{2}} \exp[g_{H_2}^{rot} + g_{H_2}^{vib}] \exp[(D_0/(k_B T) - g_0^c)] \quad (4.29)$$

Die $\sqrt{2}$ ergibt sich aus der doppelten Masse des Atoms für das Molekül in Λ_H und dem Spin der Atome. In dieser Schreibweise kann der Wechselwirkungsanteil g_0^c als Reduzierung der Dissoziationsenergie D_0 gedeutet werden.

Die Wechselwirkungsbeiträge g_0^c sorgen für die Druckdissoziation, dies heißt, mit zunehmendem Druck bzw. zunehmender Dichte steigt der Dissoziationsgrad $\alpha = n_H/n_0$. Bei der Saha-Gleichung, also dem Massenwirkungsgesetz ohne Wechselwirkungsterme g_0^c , tritt eine Druckdissoziation nicht auf. In Abbildung 4.3 ist der Dissoziationsgrad für verschiedene Dichten und Temperaturen dargestellt. Zu erkennen ist, wie bei kleinen Dichten der Dissoziationsgrad gemäß der Saha-Gleichung abnimmt. Sobald Wechselwirkungen einsetzen, steigt der Dissoziationsgrad ab etwa $0,5 \text{ g/cm}^3$ mit zunehmender Dichte auf 1 an. Der Dissoziationsgrad nimmt mit zunehmender Temperatur zu. Die exakte Behandlung der Paarkorrelationsfunktion für ein Mehrkomponentensystem führten zu einer ausgeprägteren Druckdissoziation, wie der Unterschied zwischen dieser Arbeit (FVT III) und der früheren Arbeit (FVT II) zeigt.

4.3.2 Gültigkeitsbereich

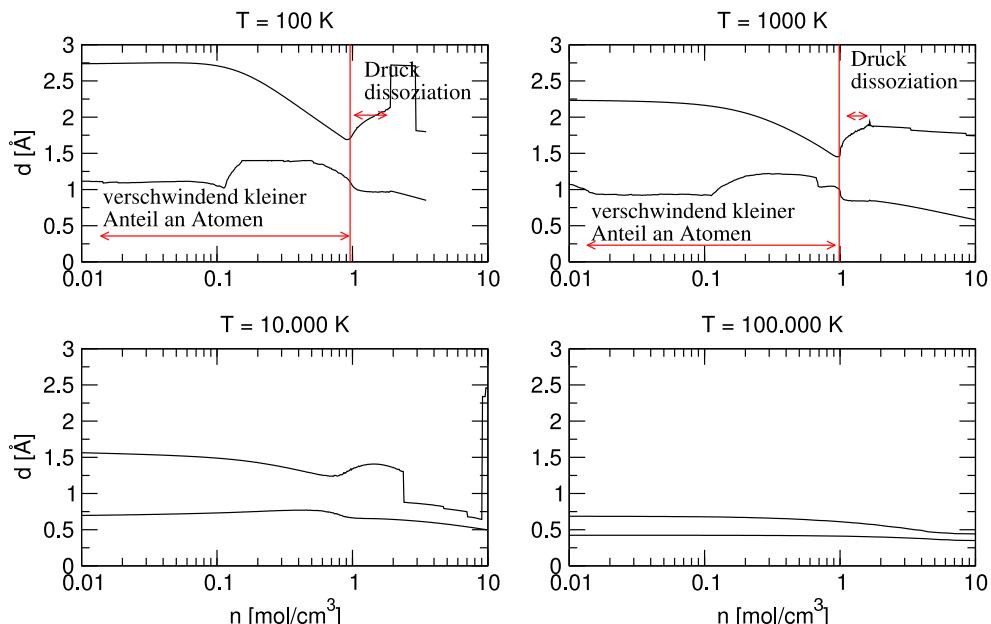


Abbildung 4.4: Für die vier Temperaturen von 10^2 bis 10^5 sind die Durchmesser der harten Kugeln dargestellt, die sich aus der Minimierung der freien Energie f^c ergeben. Die obere Kurve stellt die Molekül- und die untere die Atomdurchmesser dar.

Bei der FVT gibt es Grenzen, was die Übereinstimmung mit den Experimenten betrifft. Bevor diese Grenzen erreicht werden, treten bei der FVT Parameter auf, die von der Modellvorstellung nicht mehr sinnvoll sind. Die harte Kugeldurchmesser oder die Packungsdichten gehen als Minimierungsparameter ein. Werden die Durchmesser zu klein, benutzen wir ein Potential, das physikalisch nicht mehr begründet ist. Zu große Durchmesser fanden wir nicht. Gegen große Durchmesser im anziehenden Bereich des Exponential-6-Potentials spräche aus physikalischer Sicht ohnehin nichts.

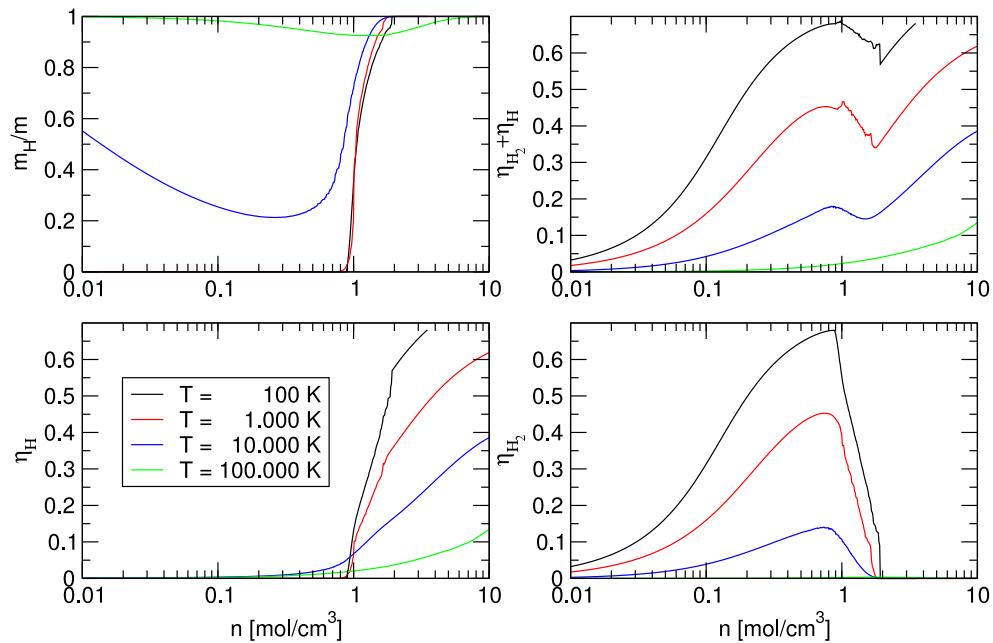


Abbildung 4.5: Für die vier Temperaturen von 10^2 bis 10^5 sind die Dissoziationsgrade (m_x/m), die Gesamtpackungsdichte (η) und die Packungsdichten der Atome (η_H) und Moleküle (η_{H_2}) dargestellt.

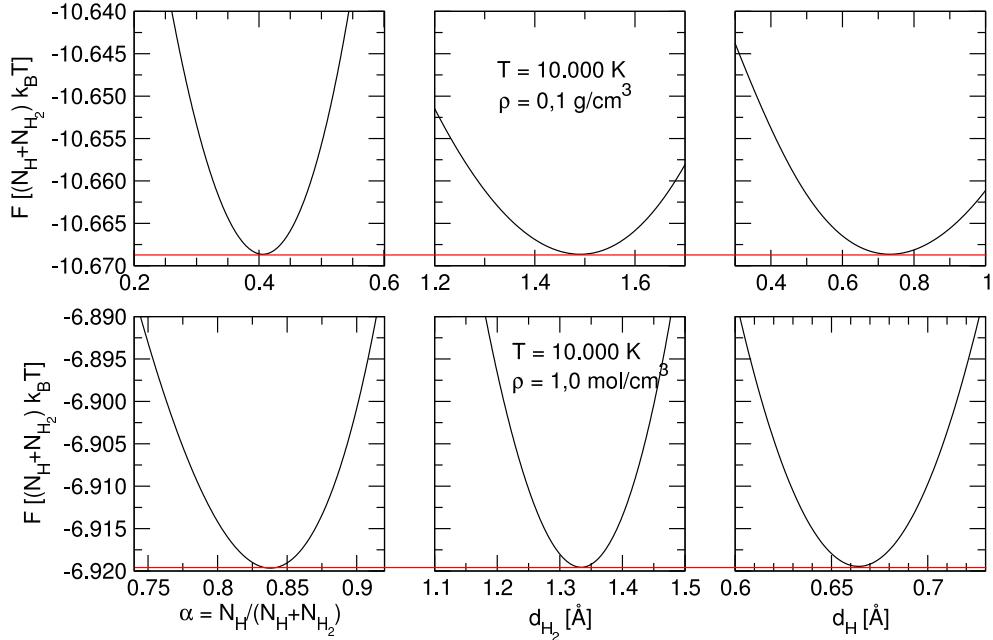


Abbildung 4.6: Bei der Temperatur von 10.000 K ist die freie Energie f für die Dichten 0,1 und $1,0 \text{ g}/\text{cm}^3$ dargestellt in Abhängigkeit von den drei Minimierungsparametern α , d_H und d_{H_2} .

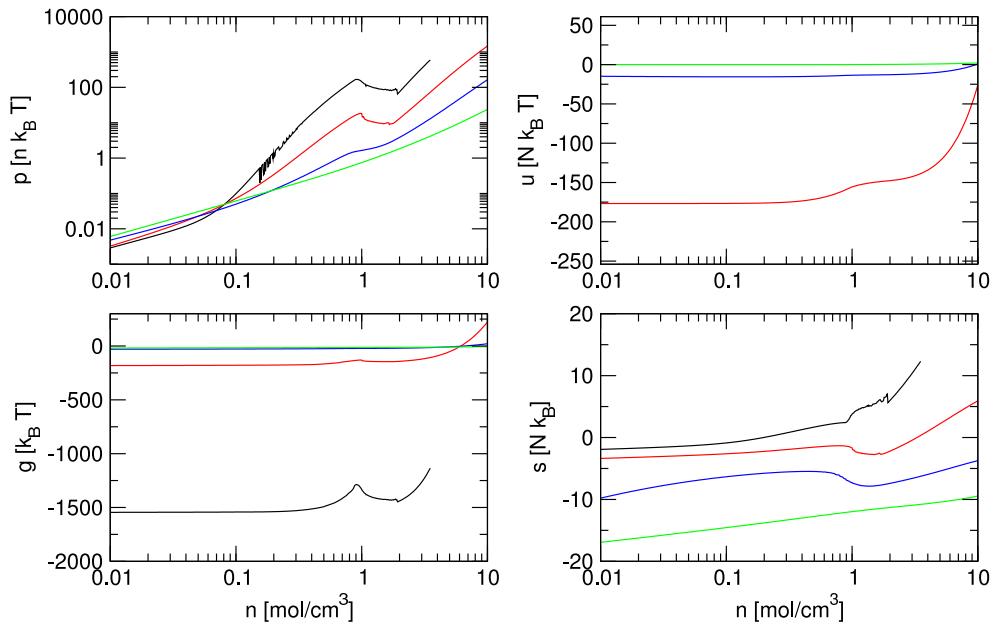


Abbildung 4.7: Für die vier Temperaturen von 10^2 bis 10^5 ist der Druck p , die innere Energie u , das chemische Potential g und die Entropie s dargestellt.

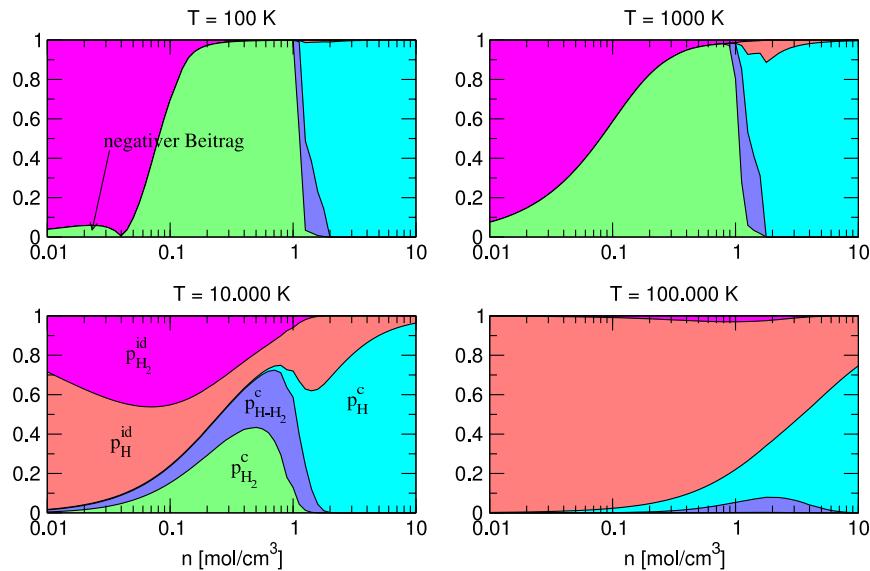


Abbildung 4.8: Für die vier Temperaturen von 10^2 bis 10^5 sind die einzelnen Druckanteile in Abhängigkeit von der Dichte dargestellt. Sie sind von oben nach unten dargestellt: Idealteil der Moleküle $p_{H_2}^{id}$ (pink), Idealteil der Atome p_H^{id} (hellrot), Wechselwirkungsteil der Atome p_H^c (hellblau), Wechselwirkungsanteil zwischen den Atomen und Molekülen $p_{H-H_2}^c$ (türkis) und Wechselwirkungsanteil der Moleküle $p_{H_2}^c$ (grün).

Um sich ein Bild über die Parameterbereiche machen zu können, haben wir in Abbildung 4.4 die Durchmesser für extreme Dichte und Temperaturbereiche dargestellt. Hin zu kleinen Dichten stellt sich ein Grenzwert für die Durchmesser ein. Tritt eine Komponente nicht mehr auf, weil der Dissoziationsgrad 0 oder 1 ist, so ist dort eine numerisch instabile Durchmesserberechnung zu sehen. Für die Rechnungen selbst hat dies natürlich keinen Einfluss. Um $1 \text{ mol}/\text{cm}^3$ sehen wir die Auswirkungen der Druckdissoziation, die mit zunehmender Dichte die Durchmesser aufgrund der Dissoziation wieder anwachsen lässt. Dieses Verhalten ist bei 100.000 K , der größten gezeigten Temperatur, nicht mehr zu sehen. In der Abbildung 4.5 sehen wir bei dieser Temperatur nur in einem kleinen Dichtebereich ein Vorkommen von Molekülen. Wir sehen dort am Dissoziationsgrad bereits eine Verletzung der Systematik, die bei den niedrigeren Temperaturen zu finden ist: Normalerweise ist der Dissoziationsgrad mit höherer Temperatur größer. Hier macht sich bereits die Fortsetzung des Potentials zu kleinen Abständen hin bemerkbar, bei der Atome abstoßender werden als Moleküle.

Die Abbildung 4.5 zeigt zusätzlich zu dem gerade besprochenen Dissoziationsgrad noch die Packungsdichten η . Sie geben an, welchen Teil des Gesamtvolumens eine Kugelsorte einnimmt. Sobald die gesamte Packungsdichte $\eta_H + \eta_{H_2}$ über 0,3 steigt, müssen wir von Festkörpereigenschaften ausgehen. Vergleiche mit dem Druck von DiamantstempelExperimenten ergeben dennoch gute Übereinstimmungen. Der Wert von 0,3 tritt schon bei Dichten und Temperaturen auf, die hier interessant sein könnten: zum Beispiel bei 5000 K und $0,7 \text{ g}/\text{cm}^3$. Bei Rechnungen für Einfachstoßexperimente kommen wir allerdings noch nicht in diesen Bereich.

Völlig unphysikalisch ist das Ergebnis bei Packungsdichten oberhalb von 0,71. Dies ist der maximale Wert, der bei der dichtesten Kugelpackung möglich ist. Dieser Wert kann nur noch bei Mischungen unterschiedlich großer Kugeln übertroffen werden. Wir überschreiten diesen Wert nur bei sehr kleinen Temperaturen und großen Dichten. Der hier interessierende Bereich ist nicht betroffen.

Bei Temperaturen unter 10.000 K haben wir einen starken Anstieg der Druckdissoziation. Gleichzeitig sehen wir bei den Packungsdichten Artefakte. Diese röhren her aus der numerisch zu ungenau berechneten freien Energie. In Abbildung 4.6 zeigen wir, wie scharf das Minimum aussieht und so prinzipiell leicht zu finden wäre. Jedoch eine Vergrößerung des Minimums würde eine Stufenfunktion in einem noch weiter zu minimierenden Bereich zeigen, weil die Genauigkeit der reellen Zahlen des Rechners erreicht ist. Das Minimum kann so nicht exakt gefunden werden. Geringste Abweichungen wirken sich bei stark änderndem Dissoziationsgrad beachtlich aus. Dies macht die Erläuterung der Abbildung 4.9 in Abschnitt 4.3.3 deutlich: Die Druckisothermen der reinen Atom- oder Molekülfuide liegen weit auseinander; ändert sich der Dissoziationsgrad geringfügig, ändert sich der Druck beträchtlich.

Die Auswirkungen für die thermodynamischen Größen stellen wir in Abbildung 4.7 dar. Die numerischen Artefakte finden sich bei niedrigen Temperaturen besonders deutlich beim Druck wieder. Betrachten wir das chemische Potential, ließe sich bei 100 K oder 1000 K sogar ein Phasenübergang konstruieren, der mit einem Übergang zum Festkörper gedeutet werden kann. Diese Überlegung hat bei der zusätzlichen Betrachtung der Gesamtpackungs-

dichte Sinn. Allerdings ist dies nicht Gegenstand dieser Arbeit. Für diese Bereiche gibt es bereits gute Zustandsgleichungen aus dem Bereich der Festkörperphysik (z.B. Hemley u. a., 1990).

Zur Verdeutlichung, welche Beiträge der FVT eine Rolle spielen, haben wir in Abbildung 4.8 die verschiedenen Druckanteile bei unterschiedlichen Dichten und Temperaturen dargestellt. Deutlich wird: Bei kleinen Dichten überwiegen die Idealanteile und bei großen die Wechselwirkungsanteile. Wie wir in Kapitel 5 sehen werden, ist dies beim idealisierten vollständig ionisierten Plasma nicht der Fall. In den Extrembereichen kleiner und großer Dichten kommen die jeweils anderen Anteile nicht mehr vor. Im Bereich der Molekülbildung und Druckdissoziation bei 10.000 K ist gut zu erkennen, wie sich die Anteile verändern. Bei den niedrigen Temperaturen 100 K und 1000 K besteht die Besonderheit, dass zuerst die Wechselwirkungsbeiträge die Idealbeiträge der Moleküle dominieren, bevor es zu einer starken Druckdissoziation kommt. Über den kleinen Dichtebereich der Druckdissoziation hinweg überwiegen anschließend sofort die Wechselwirkungsbeiträge der Atome. Bei der hohen Temperatur von 100.000 K dominiert bei kleinen Dichten der Idealteil der Atome. Bei kleineren Temperaturen überwiegt der Idealteil bei um Größenordnungen kleinere Dichten. Dieses Verhalten zeigt der Vergleich mit der 10.000 K Isotherme. Ansonsten spielt sich bei 100.000 K nahezu alles in der atomaren Phase ab. Nur bei einem kleinen Dichtebereich tragen Moleküle zum Druck bei.

4.3.3 thermodynamische Größen

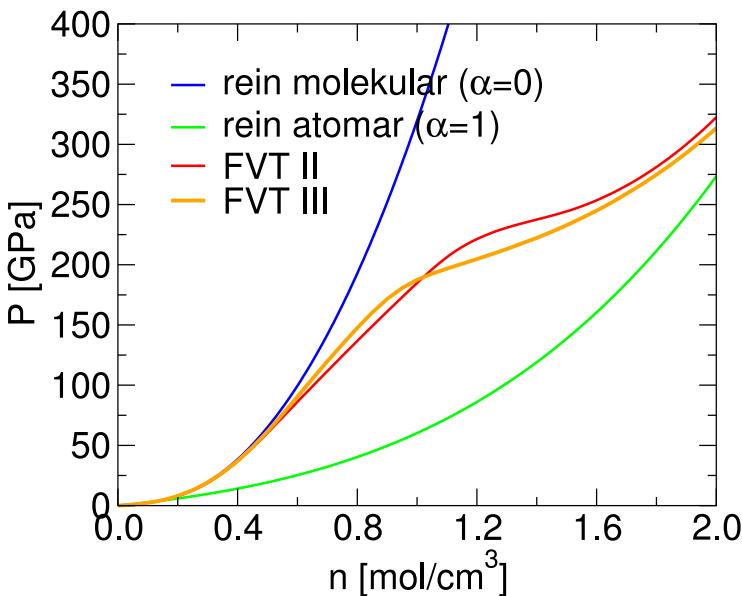


Abbildung 4.9: Druckisotherme bei 3000 K für Atome (grün) und Moleküle (blau) sowie die resultierenden Isothermen durch Dissoziation: in rot FVT II und in gelb FVT III.

Mit der Berechnung der freien Energie im chemischen Gleichgewicht können wir die thermodynamischen Größen angeben. In Abbildung 4.9 zeigen wir die Auswirkung der Dissoziation auf den Druck. Die obere Isotherme zeigt den Druck für rein molekularen

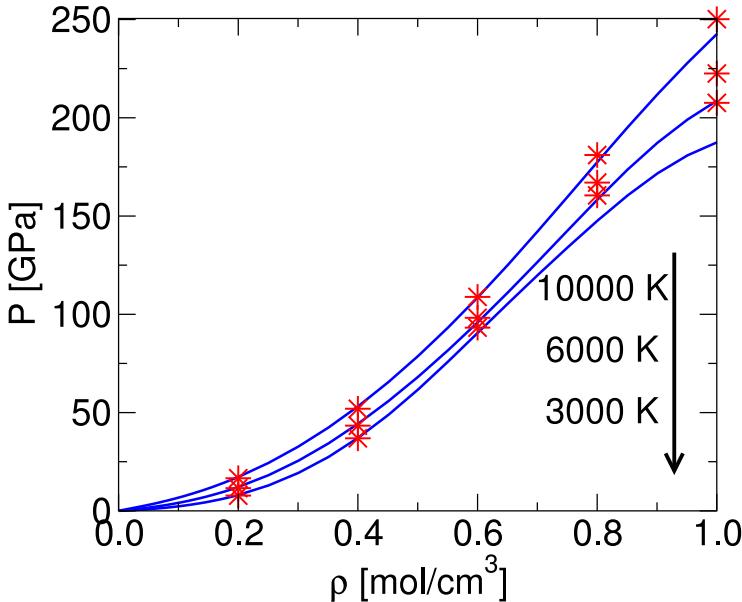


Abbildung 4.10: Druckisotherme für drei Temperaturen zeigt gute Übereinstimmung mit MC-Rechnungen.

Wasserstoff; die untere für rein atomaren. Mit zunehmendem Dissoziationsgrad bei zunehmender Dichte geht die resultierende Isotherme des Gemisches aus Atomen und Molekülen vom rein molekularen zum atomaren Ast über. Gezeigt wird auch der Unterschied zwischen der resultierenden dieser Arbeit (FVT III) und der früheren Arbeit (FVT II).

Mit Hilfe der Monte Carlo Simulation von [Bunker u. a. \(1997a\)](#) untersuchten wir, ob die FVT tatsächlich eine gute Methode ist, thermodynamische Größen aus effektiven Paarpotentialen zu berechnen, ohne die zugehörigen Paarkorrelationsfunktionen zu kennen. In der Monte Carlo Simulation wurden die gleichen Potentiale vorgegeben, wie hier in der FVT verwendet wurden. Als Dissoziationsgrad wurde das Ergebnis der FVT benutzt. Abbildung 4.10 zeigt eine hervorragende Übereinstimmung zwischen den Monte Carlo Simulationen und der FVT III. Erst bei größeren Dichten wie $0,8 \text{ g/cm}^3$ sind deutliche Abweichungen zu sehen, die umso größer sind, je kleiner die Temperatur ist.

Für Dichten bis $0,2 \text{ g/cm}^3$ konnten wir den Druck und die innere Energie mit den Pfadintegral Monte Carlo (PIMC) Rechnungen von [Militzer und Ceperley \(2001\)](#) verglichen. Die Abbildung 4.11 und 4.12 zeigen eine gute Übereinstimmung. Bei hohen Temperaturen - wie es dort bei 31250 K zu sehen ist - gibt es wegen der in der FVT III fehlenden Druckionisation bereits eine deutliche Abweichung. Bei kleinen Temperaturen stoßen die PIMC Rechnungen an ihre Grenzen. In diesem Bereich stimmen die FVT III Rechnungen mit der Standardzustandsgleichung Sesame von [Kerley \(1972b\)](#) überein.

Die Abbildung 4.13 zeigt Hugoniotkurven $U_1 - U_0 = \frac{1}{2}(P_1 + P_0)(V_1 - V_0)$, die eine Lösung der möglichen Tripel Dichte, innerer Energie und Druck sind, die bei der Stoßkompression erreicht werden können in Abhängigkeit von der Kolbengeschwindigkeit, also der Kompressionsgeschwindigkeit. Die Hugoniotkurve der FVT III zeigt eine deutlich höhere Kompression als die Standardzustandsgleichung Sesame von [Kerley \(1972b\)](#). Sie weist die gleichen Eigenschaften wie die Hugoniotkurve des Linear Mixing Modells von [Ross \(1998\)](#) auf, indem sie bei 1Mbar eine deutlich stärkere Kompression ρ/ρ_0 als die Kompressionsgren-

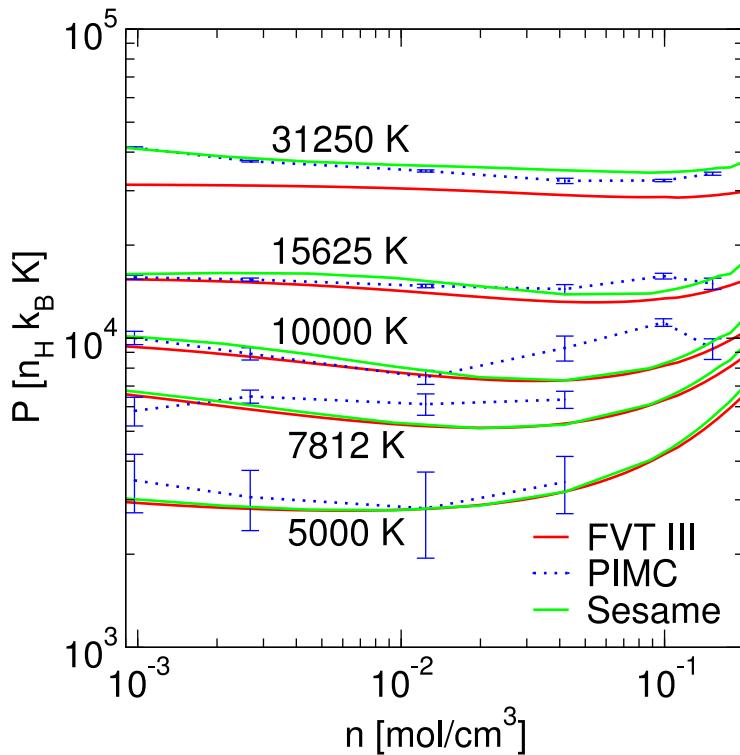


Abbildung 4.11: Vergleich der Drücke der FVT III mit den PIMC Ergebnissen (Militzer und Ceperley, 2001), die mit Fehlerbalken dargestellt sind, und der Sesame Zustandsgleichung.

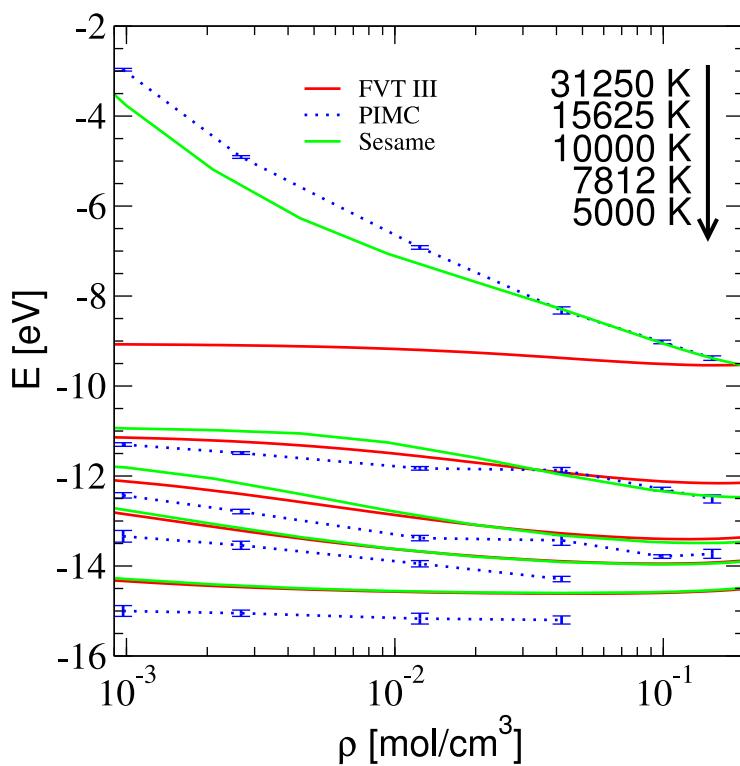


Abbildung 4.12: Vergleich der inneren Energien der FVT III mit den PIMC Ergebnissen (Militzer und Ceperley, 2001), die mit Fehlerbalken dargestellt sind, und der Sesame Zustandsgleichung. Für jede dargestellte Zustandsgleichung ist die Temperatur von oben nach unten wie in der Abbildung bezeichnet. Zu beachten ist: Für die beiden größten Dichtewerte sind bei PIMC die beiden niedrigsten Temperaturwerte nicht gegeben.

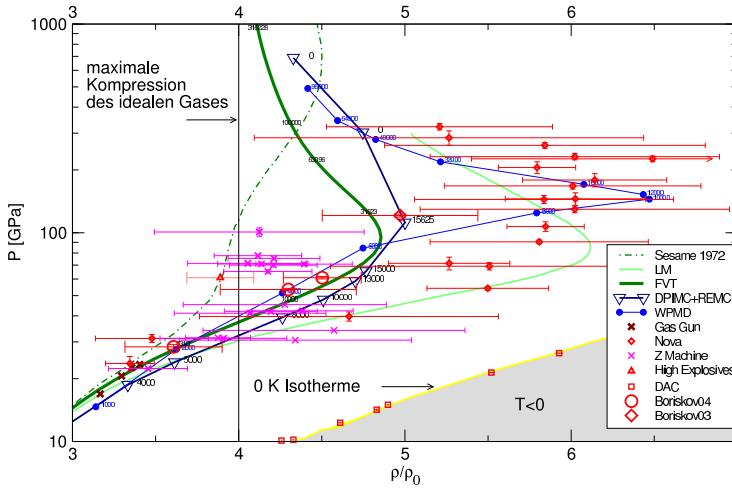


Abbildung 4.13: Vergleich der Hugoniotkurven. Die senkrechte Linie kennzeichnet den Grenzwert des idealen Gases mit maximal vierfacher Kompression. In grün ist die Hugoniotkurve der FVT III gezeigt. Sie liegt zwischen den Experimenten der Z-Maschine von Knudson u.a. (2003) und des Nova Lasers von Cauble (1999) und zwischen der Standardzustandsgleichung Sesame und dem Linear-Mixing-Modell von Ross (1998).

ze des idealen Gases mit $\rho/\rho_0 = 4$ aufweist und zu höheren Kompressionsgeschwindigkeiten bzw. Drücken die Kompression zur idealen Gas Grenze zurückgeht. Die Hugoniotkurve der FVT III stimmt in diesem Bereich weder mit den Stoßexperimenten mit der Z-Maschine von Knudson u.a. (2003) überein, noch mit den dazu widersprüchlichen Nova Laser Experimenten von Cauble (1999); sondern sie liegt genau dazwischen. Erst unter Einbeziehung der Druckionisation erhalten wir eine Übereinstimmung, wie wir in Kapitel 6 sehen werden.

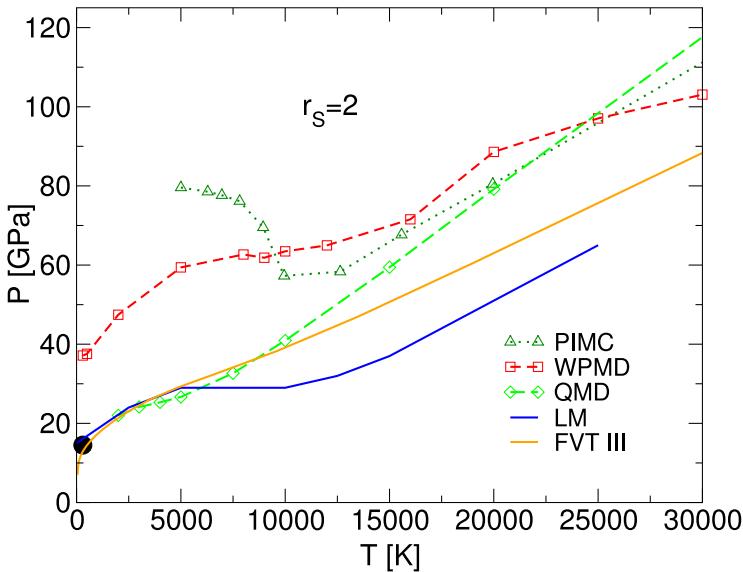


Abbildung 4.14: Druckisochoren bei $r_s=2$.

In der Arbeit von Juranek u.a. (2002) untersuchten wir die Abhängigkeit von der Wechselwirkung zwischen Atomen und Molekülen. Um bessere Ergebnisse zu erzielen, gab es von Aviram u.a. (1976a,b) den Ansatz, die Abstände zwischen einem Atom und einem Molekül nicht als additiv zu betrachten. Dieses wird mit der Anschauung verbunden, dass ein System harter Kugeln mit verschiedenen Kugeldurchmessern höhere Packungsdichten

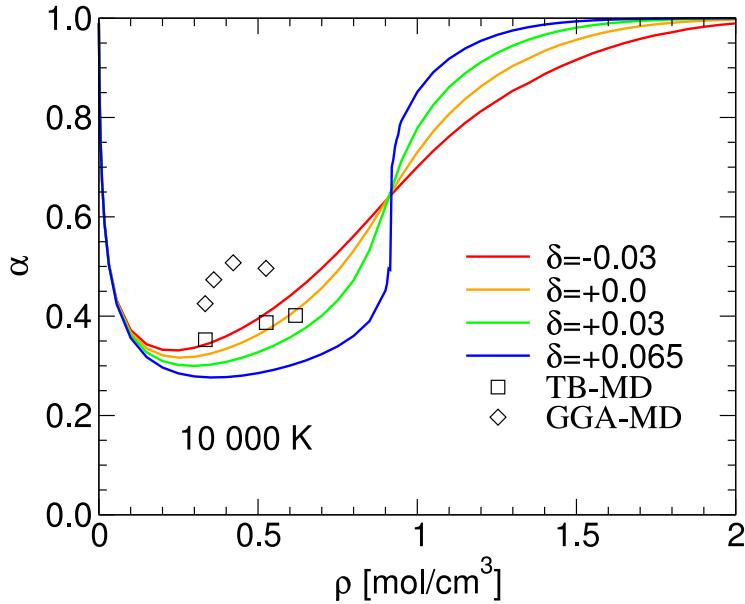


Abbildung 4.15: 10000 K Isothermen des Dissoziationsgrades der FVT III für eine H-H₂ Mischung als Funktion der Dichte für verschiedene Nichtadditivitätsparameter δ . Quadrate: TB-MD (Lenosky u. a., 1999), Rauten: GGA-MD (Collins u. a., 2001).

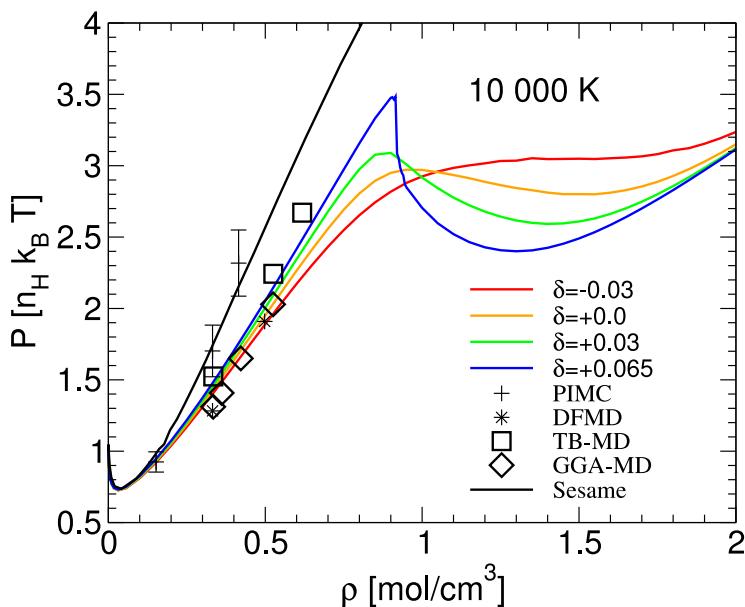


Abbildung 4.16: 10000 K Isothermen des Drucks der FVT III für eine H-H₂ Mischung als Funktion der Dichte für verschiedene Nichtadditivitätsparameter δ . Pluszeichen mit Fehlerbalken: PIMC (Militzer und Ceperley, 2001), Sternchen: DFMD (Galli u. a., 2000), Quadrate: TB-MD (Lenosky u. a., 1999), Rauten: GGA-MD (Collins u. a., 2001).

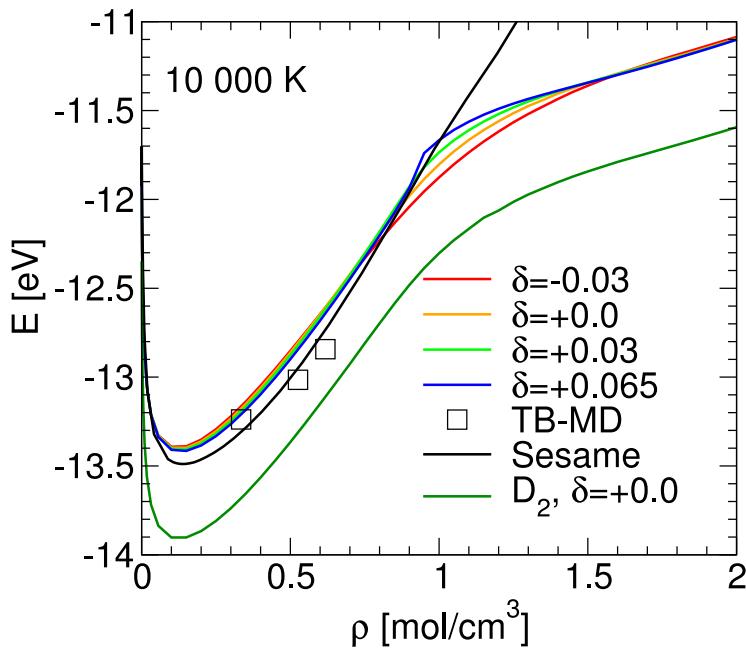


Abbildung 4.17: Veränderung der inneren Energie mit dem Nicht-Additivitätsparameter δ .

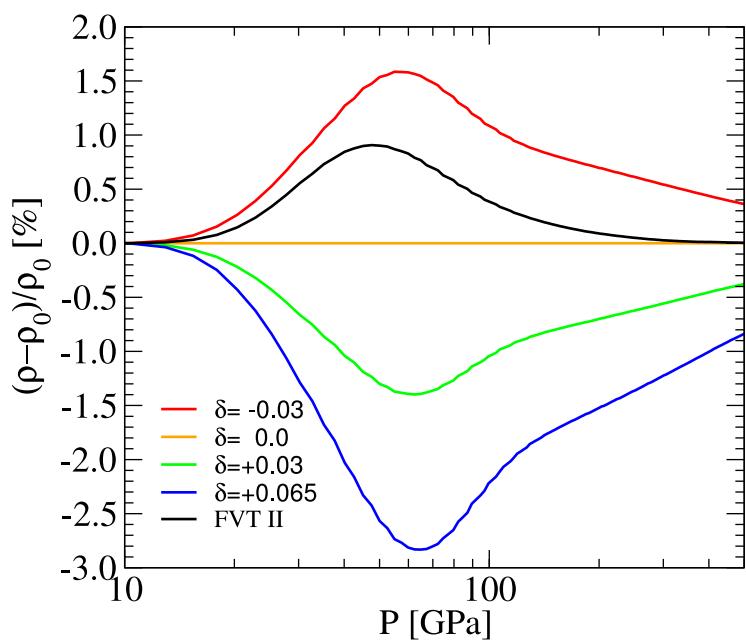


Abbildung 4.18: Abweichung der maximalen Kompression bei einem Stoßexperiment durch Veränderung des Nicht-Additivitätsparameters δ .

erreichen können als Systeme mit nur einem Kugeldurchmesser. So wurde ein Nichtadditivitätsparameter δ eingeführt, der

$$d_{H-H_2} = \frac{d_H + d_{H_2}}{2}(1 + \delta) \quad (4.30)$$

setzt. In den Abbildungen 4.15, 4.16, 4.17 und 4.18 wird der Einfluss von δ auf den Dissoziationsgrad, den Druck, die innere Energie und die maximale Kompression der Hugoniotkurve dargestellt. Anhand der Experimente und der anderen Modelle konnten wir keinen Nichtadditivitätsparameter δ festlegen, der zu einer besseren Übereinstimmung geführt hätte. Die Abbildung 4.18 zeigt den Einfluss auf die maximale Kompression bei der Hugoniotkurve. Der Einfluss ist zu gering, um berücksichtigt werden zu müssen. Die Druckionisation ist wesentlich stärker dominant. Die Berücksichtigung dieses Parameters haben wir deshalb für die weiteren Rechnungen verworfen.

Kapitel 5

Vollständig ionisiertes Wasserstoffplasma - Padénäherungen

Ziel der Padénäherungen ist, ein vollständig ionisiertes Elektron-Proton-Plasma zu beschreiben. Wir verwenden die Näherungen von Stolzmann und Blöcker (2000), die aus den Arbeiten von Ebeling und Richert (1982); Richert (1982); Ebeling und Richert (1985); Stolzmann und Blöcker (1996a,b); Stolzmann (1996); Stolzmann und Ebeling (1998); Stolzmann und Blöcker (1999) hervorgegangen sind. Wir stellen die verschiedenen Anteile vor und errechnen schließlich einige thermodynamische Größen, die wir mit Ergebnissen anderer Veröffentlichungen vergleichen.

5.1 Anteile der Padénäherungen

Die einzelnen Anteile der freien Energie und des chemischen Potentials werden im Folgenden vorgestellt. Wir setzen die gesamte freie Energie f_1 und das chemische Potential g_1 zusammen:

$$\begin{aligned} f_1 &= f_e^{id} + f_{ee}^c + f_{ee}^x \quad \text{Ideal-, Wechselwirkungs-, und Austauschanteil der Elektronen} \\ &\quad + f_i^{id} + f_{pp}^c + f_{pp}^{qc} \quad \text{Ideal-, Wechselwirkungs- und Quantenkorrekturanteil der Protonen (5.1)} \\ &\quad + f_{ep}^c \quad \text{Wechselwirkungsanteil zwischen Elektronen und Protonen} \\ g_1 &= g_e^{id} + g_{ee}^c + g_{ee}^x \quad \text{Ideal-, Wechselwirkungs-, und Austauschanteil der Elektronen} \\ &\quad + g_p^{id} + g_{pp}^c + g_{pp}^{qc} \quad \text{Ideal-, Wechselwirkungs- und Quantenkorrekturanteil der Protonen (5.2)} \\ &\quad + g_{ep}^c \quad \text{Wechselwirkungsanteil zwischen Elektronen und Protonen} \end{aligned}$$

Padénäherungen geben die zugrunde liegenden Funktionen und Werte ausgesprochen genau wieder. Ableitungen von Padénäherungen können allerdings sehr schlecht sein. Wir benötigen die freie Energie als thermodynamisches Potential, um daraus andere Größen meist über Ableitungsrelationen zu berechnen. Um die Ableitungsrelationen zu umgehen, wurden nicht nur Padénäherungen für die freie Energie konstruiert, sondern auch für das chemische Potential. Statt über Ableitungsrelationen erhält man z.B. den Druck aus der Differenz $p = g - f$.

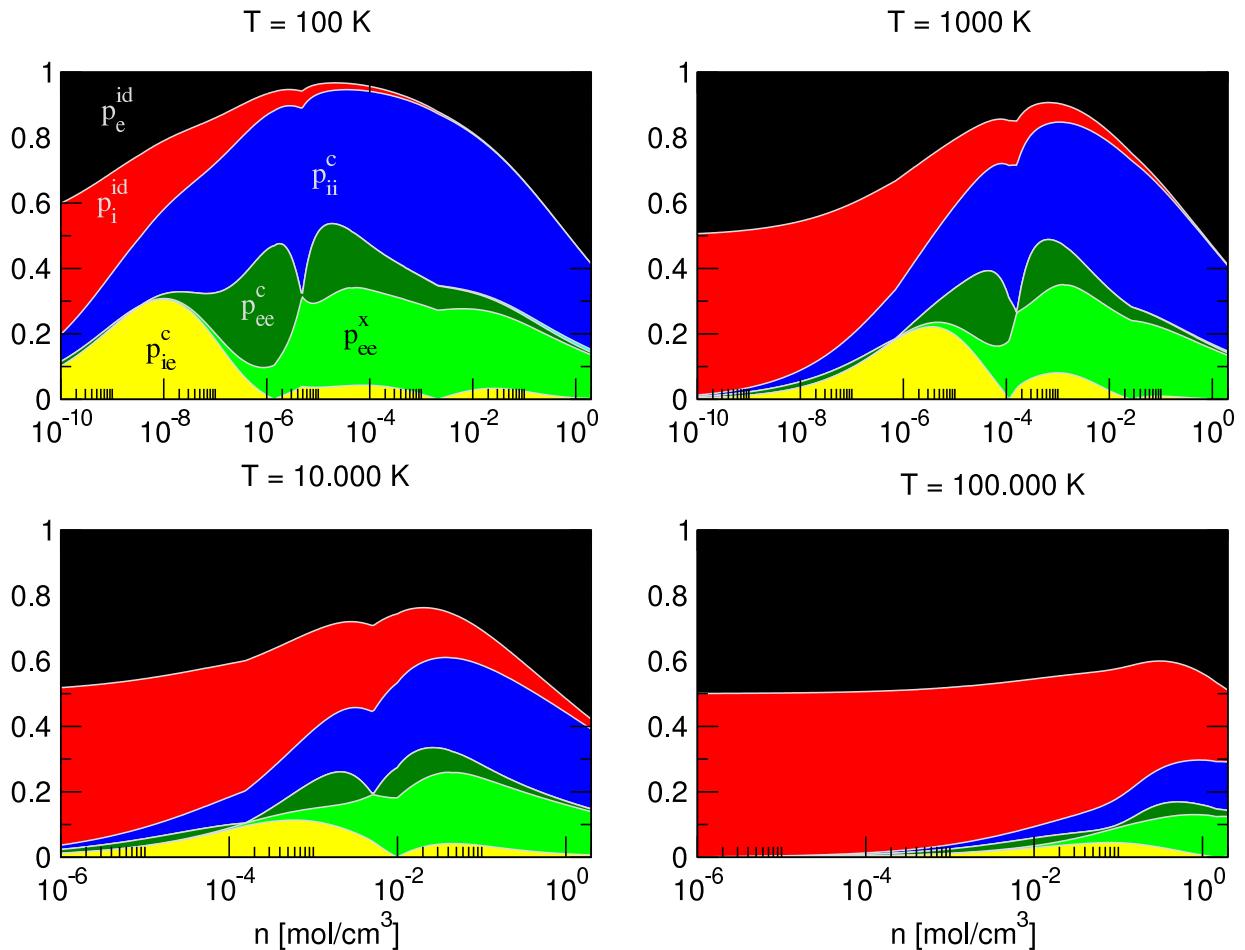


Abbildung 5.1: Aufgetragen ist die auf 1 normierte Summe aus den Beträgen der einzelnen Anteile p_i^j . Dies zeigt deren Bedeutung bei unterschiedlichen Dichten und Temperaturen. Manche Druckbeiträge haben teilweise negative Beiträge. Deshalb gibt es bei deren Anteilen automatisch einen Nulldurchgang, wobei der Anteil natürlich verschwindet. Dies ist bei der Betrachtung zu berücksichtigen.

In der Abbildung 5.1 ist die Bedeutung der einzelnen Druckanteile dargestellt. Zu erkennen ist, in welchen Bereichen die Idealanteile überwiegen und in welchen Bereichen die Wechselwirkungen eine entscheidende Rolle spielen. Hin zu hohen Temperaturen überwiegen immer stärker die Idealanteile. Wechselwirkungsanteile spielen dort eine untergeordnete Rolle. Selbst bei sehr hohen Dichten spielen die Wechselwirkungsanteile keine Rolle mehr. Hier dominiert der Elektronendruck. Nur genau der betreffende Dichtebereich bis 1 g/cm^3 weist überwiegende Wechselwirkungsanteile auf und zwar umso deutlicher, je niedriger die Temperatur ist.

In Abbildung 5.2 betrachten wir die freie Energie f_1 , das chemische Potential g_1 , der Unterschied der beiden Arten, die Drücke zu berechnen, und den Druck p_1 . Der Druck kann aus der Ableitung der freien Energie berechnet werden zu p^{abl} und aus der Differenz von $g - f = p^{diff}$. In dieser Reihenfolge werden in den folgenden Abbildungen die äquivalenten Größen der Anteile dargestellt. Die freie Energie und das chemische Potential ändern sich über die Temperatur um Größenordnungen. Das chemische Potential zeigt Andeutungen eines Phasenübergangs in dem Bereich, wo das chemische Potential mit zunehmender Dichte abnimmt. In diesem Bereich stellen wir negative Drücke fest. Die Abweichungen der beiden Arten, die Drücke zu berechnen, ist natürlich besonders dort groß, wo die Druckisothermen den Wert Null durchlaufen. Hin zu kleinen und großen Dichten stimmen sie wieder sehr gut überein.

Idealbeitrag der Elektronen

Für den Idealbeitrag der Elektronen gibt es exakte relativistische Ausdrücke:

$$f_e^{id} = g_e^{id} - p_e^{id} \quad (5.3)$$

$$p_e^{id} = \frac{2}{\Lambda_e^3 n_e} \left(J_{3/2}[\lambda, g_e^{id}] + \frac{5}{4} \lambda J_{5/2}[\lambda, g_e^{id}] \right) \quad (5.4)$$

$$n_e = \frac{2}{\Lambda_e^3} \left(J_{1/2}[\lambda, g_e^{id}] + \frac{3}{2} \lambda J_{3/2}[\lambda, g_e^{id}] \right) \quad (5.5)$$

$$\lambda = \frac{k_B T}{mc^2} \quad (5.6)$$

Dabei sind die J_ν die relativistischen Fermi-Dirac Integrale aus Abschnitt B.3. Wir verwenden jedoch nur die nicht relativistischen Ausdrücke, die für unsere Anwendung ausreichend sind.

Die Teilchendichte n_e ist als Funktion von g_e^{id} gegeben. Die umgekehrte Abhängigkeit wird benötigt. Numerisch lässt sich dieses in dem hier interessanten Bereich einwandfrei lösen. Der Nachteil dabei ist die längere Rechenzeit. In dem Modell dieser Arbeit wird die Funktion $g_e^{id}[n_e]$ sehr häufig benötigt. Eine Entwicklung aus Stolzmann und Blöcker (2000)

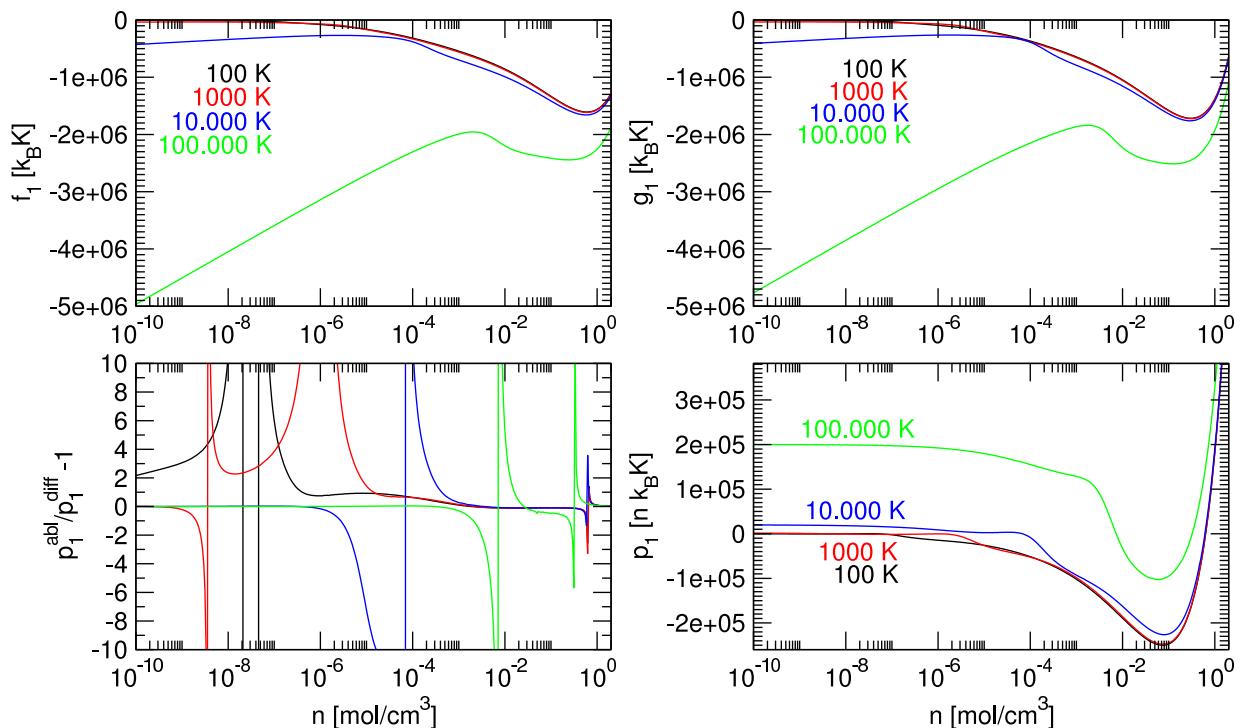


Abbildung 5.2: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abf}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind jeweils die resultierenden gesamten Größen dargestellt. In allen folgenden Abbildung ist nach dem gleichen Muster jeweils die anteilige Größe dargestellt.

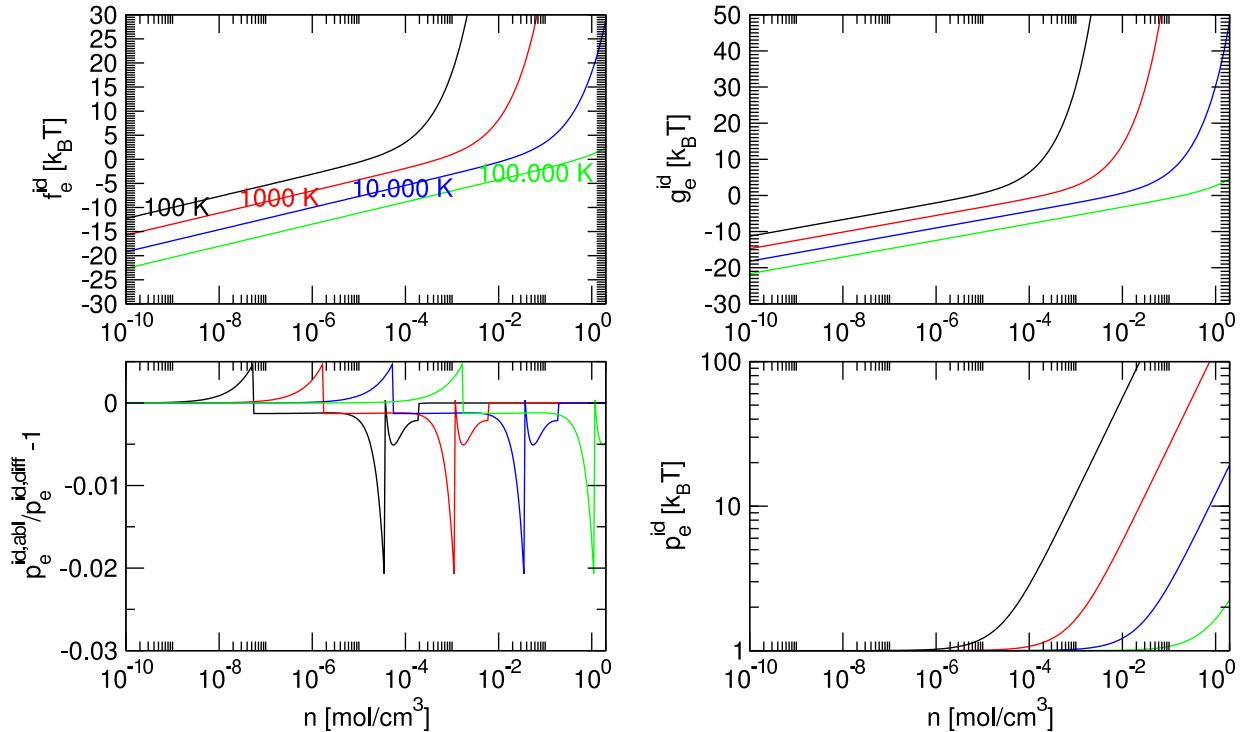


Abbildung 5.3: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für die Idealbeiträge der Elektronen dargestellt.

stellt diese Funktion in ausreichender Qualität zur Verfügung:

$$g_e^{id}[\theta] = \begin{cases} \theta^{-1} - \frac{\pi^2}{12}\theta - \frac{\pi^4}{80}\theta^3 & \text{wenn } \theta \leq 0,3 \\ \ln\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\right] - \frac{3}{2}\ln[\theta] + \frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{\pi}}\theta^{-3/2} - 2,8011 \cdot 10^{-3}\theta^{-3} & \text{wenn } \theta > 0,3 \end{cases} \quad (5.7)$$

$$\theta[n_e, T] = \frac{4}{((3\sqrt{\pi}n)^{1/3}\Lambda_e)^2} \quad (5.8)$$

Dieses Polynom ist bei Temperaturen ab 1000 K sehr genau. Es weicht deutlich weniger als 0,2 % vom tatsächlichen Wert ab. Bei kleinen Temperaturen wie 100 K und einer großen Dichte von 2 mol/cm³ weicht das Polynom vom exakten Wert bereits um 5% ab. Die Abweichung zum gesamten chemischen Potential ist unbedeutend.

Für den Druck p_e^{id} reicht der Ausdruck für ein nicht relativistisches Fermi-Gas aus. In dem hier interessanten Bereich zwischen 100 und 100.000 K und bis zu 2 mol/cm³ beträgt die relative Abweichung zum relativistischen Ausdruck weniger als 2×10^{-5} :

$$p_e^{id} = \frac{2}{\Lambda_e^3 n_e} I_{3/2}[g_e^{id}] \quad (5.9)$$

Abbildung 5.3 zeigt für den Idealbeitrag der Elektronen das systematische und konsistente Verhalten der vier ausgewählten Größen freie Energie, chemisches Potential, die Abweichung beider Druckberechnungsarten und den Druck.

Idealbeitrag der Protonen

Für die Protonen ließen sich die gleichen Ausdrücke wie für die Elektronen verwenden. Allerdings wäre dieses übertrieben. Der relativistische Ausdruck unterscheidet sich in dem hier verwendeten Dichte- und Temperaturbereich von dem klassischen nicht. Wir verwenden daher

$$f_p^{id} = \ln[n_p \Lambda_p^3] - 1 - \ln[2] \quad (5.10)$$

In diesem Ausdruck ist der Spin über $-\ln[2]$ berücksichtigt. Er ist im relativistischen Ausdruck ebenfalls enthalten. Für f_p^{id} gibt es einen Ausdruck für große Coulomb-Kopplungs-Parameter $\Gamma > 178$ aus Abschnitt B.2. Dieser wird nur bei kleinen Temperaturen T und großen Teilchendichten n erreicht. Diesen Bereich berühren wir knapp, wie der Abbildung B.1 entnommen werden kann. Der Ausdruck für $\Gamma \geq 178$ berücksichtigt bereits einen Übergang zum Festkörper und ist geringfügig verschieden vom reinen Idealbeitrag. Leider hat der Übergang einen kleinen Sprung. Wir verzichten deshalb auf seine Verwendung.

Die Abbildung 5.4 zeigt ein unproblematisches systematisches und konsistentes Verhalten des Idealbeitrags der Protonen.

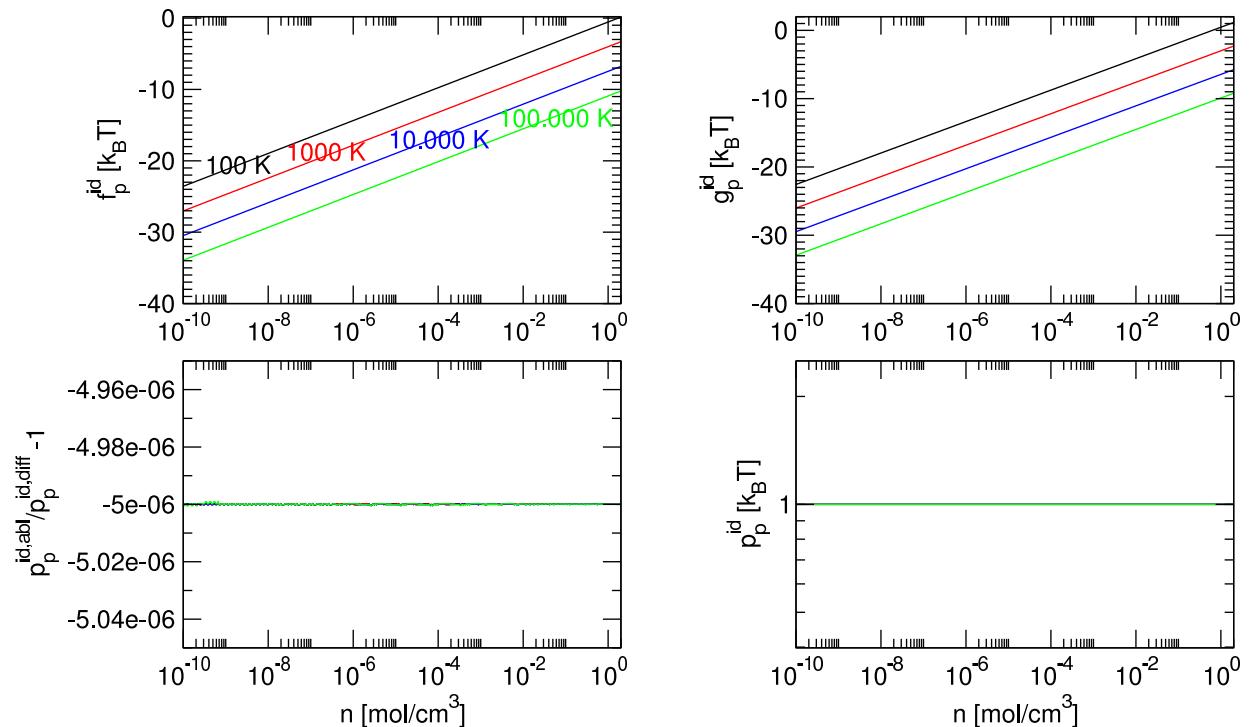


Abbildung 5.4: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{\text{abl}}/p^{\text{diff}} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für die Idealbeiträge der Protonen dargestellt.

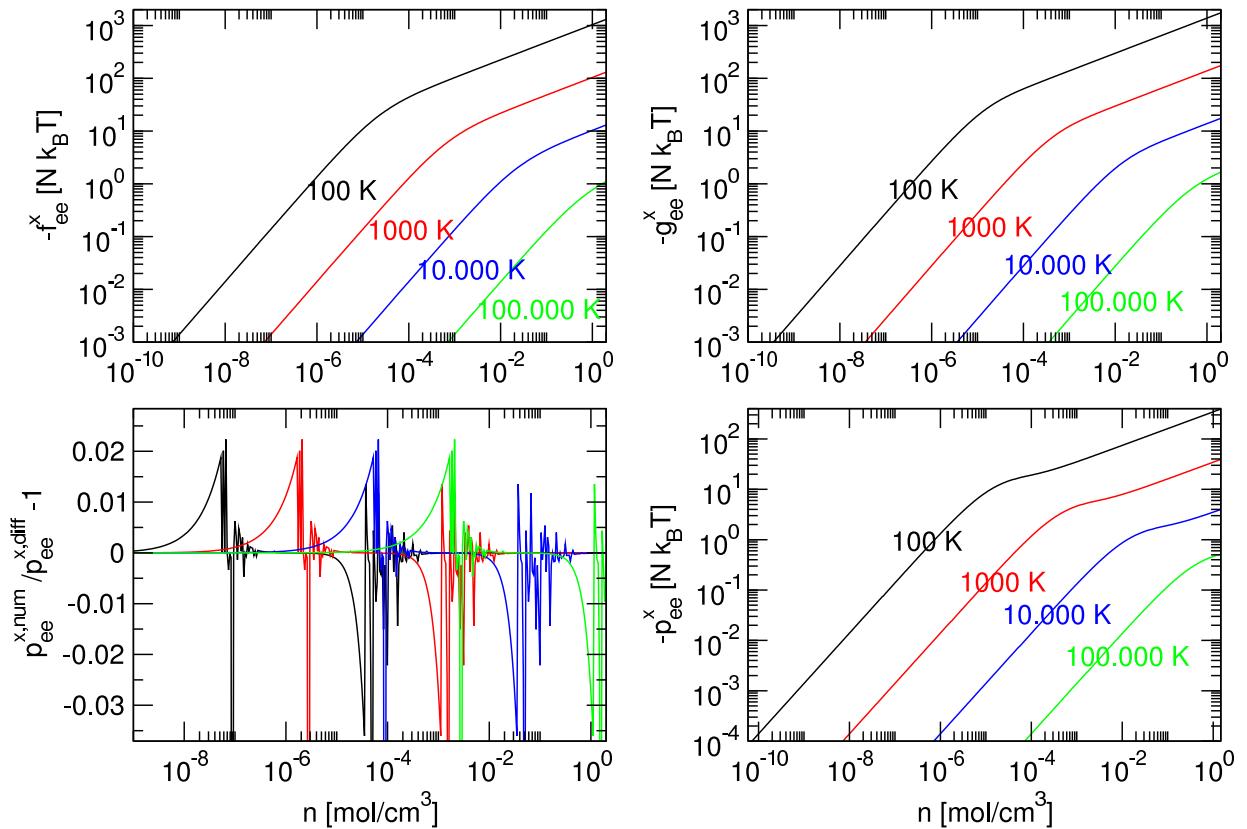


Abbildung 5.5: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für den Elektron-Elektron-Austauschanteil dargestellt.

Elektron-Elektron Austauschanteil

Aus der Hartree-Fock-Näherung ergeben sich zwei Anteile, die als Wechselwirkungs- und Austauschanteil bezeichnet werden. Der Austauschanteil ist in relativistischer Schreibweise

$$f_{ee}^x = \frac{e^2}{\pi \Lambda_e^4 n_e k_B T} J_{rel}^x \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} J_{rel}^x &= \int_0^\infty \frac{1}{e^{y_1-\psi} + 1} \int_0^\infty \frac{1}{e^{y_2-\psi} + 1} \left(2\lambda \sqrt{y_1 y_2 (2 + \lambda y_1)(2 + \lambda y_2)} \right. \\ &\quad \left. + \ln \left[\frac{y_1 + y_2 + \lambda y_1 y_2 - \sqrt{y_1 y_2 (2 + \lambda y_1)(2 + \lambda y_2)}}{y_1 + y_2 + \lambda y_1 y_2 + \sqrt{y_1 y_2 (2 + \lambda y_1)(2 + \lambda y_2)}} \right] \right) dy_2 dy_1 \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$y_k = \frac{1}{\lambda} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{p_k}{mc} \right)^2} - 1 \right) \quad (5.13)$$

Die Integrale lassen sich numerisch nicht zuverlässig berechnen. Wir beschränken uns auf die nicht relativistische Beschreibung. In dem hier interessanten Bereich zwischen 100 und 100.000 K und bis zu 2 mol/cm³ ist deren relative Abweichung zur relativistischen Beschreibung kleiner als 1,5 10⁻⁴.

$$f_{ee}^x = -\frac{2e^2}{\Lambda_e^4 n_e k_B T} \int_{-\infty}^{g_e^{id}} I_{-1/2}^2[\psi] d\psi \quad (5.14)$$

Das chemische Potential ergibt

$$g_{ee}^x = -\frac{e^2}{\Lambda_e k_B T} I_{-1/2} \quad (5.15)$$

$$(5.16)$$

Die Abbildung 5.5 zeigt die sehr gute selbstkonsistente Übereinstimmung der Größen f_{ee}^x , g_{ee}^x und p_{ee}^x .

Elektron-Elektron Wechselwirkungsanteil

Der Wechselwirkungsanteil in Hartree-Fock-Näherung ist

$$f_{ee}^c = -\frac{a_0 \Gamma_e^{3/2} - a_2 \Gamma_e^6 (\epsilon_c[r_s, 0] + \Delta \epsilon_c[r_s, \tau]) / \tau}{1 + a_1 \Gamma_e^{3/2} + a_2 \Gamma_e^6} \quad (5.17)$$

$$a_0 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + 0, 1088 \Gamma_e}} + \frac{1}{(1 + 0, 3566 \Gamma_e)^{3/2}} \right) \quad (5.18)$$

$$\tau = \frac{k_B T}{R_\infty} \quad (5.19)$$

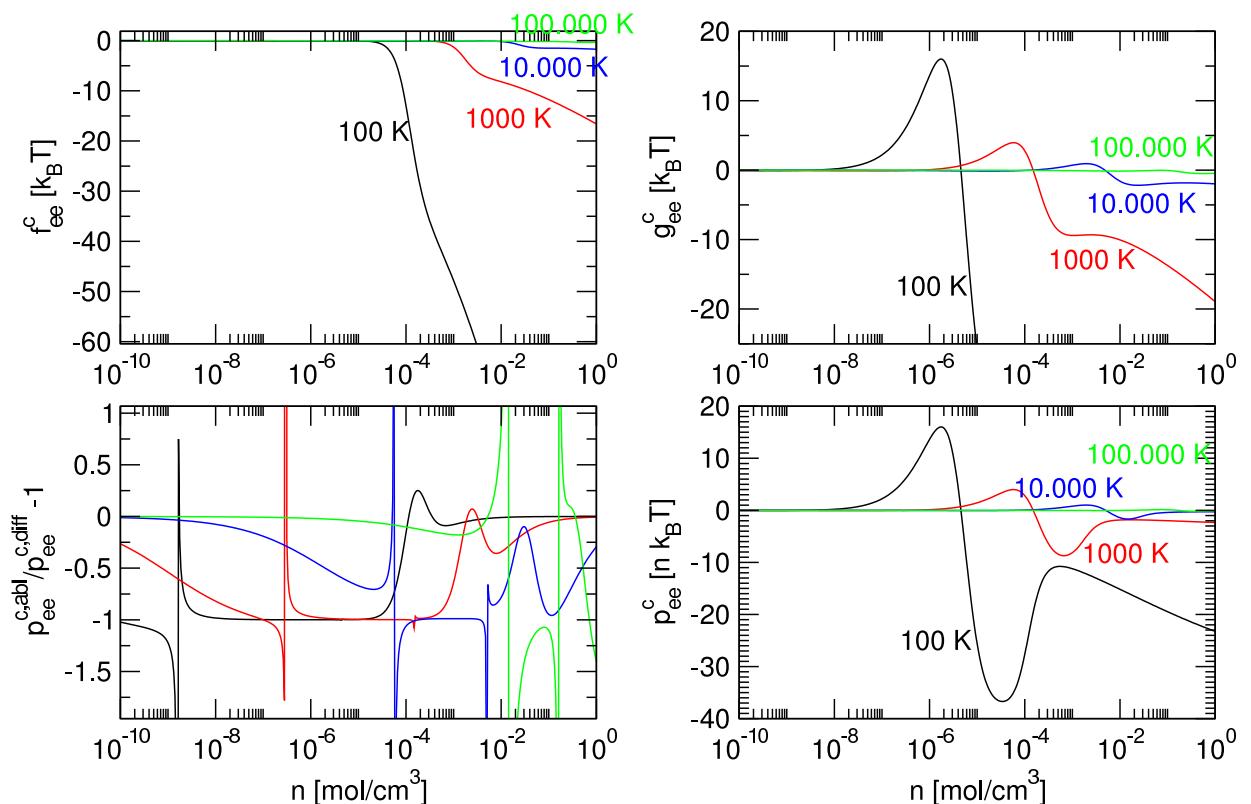


Abbildung 5.6: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für den Elektron-Elektron-Wechselwirkungsanteil dargestellt.

$$a_1 = \frac{3\sqrt{6\pi\tau}}{32} \left(1 + K_e[\sqrt{2/\tau}] \right) \quad (5.20)$$

$$a_2 = 6\tau r_s^{-2} \quad (5.21)$$

$$\Delta\epsilon_c = 2f[r_s]\theta^2 \ln[\theta] \quad (5.22)$$

$$f[r_s] = \frac{r_s + 1,05r_s^{-0,353}}{1 + 1,50r_s + r_s^2} \quad (5.23)$$

$$K_e[x] = E_2[x] - \frac{8x}{\sqrt{\pi}} \left(Q_3[x] - \frac{1}{6} \ln[x] - C_0 \right) \quad (5.24)$$

$$E_2[x] = \frac{\ln[2] + 0,0113x^2 + 0,1x^5 \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}x} - \frac{1}{x^2} \right)}{1 + \pi^{3/2} \frac{x}{18\ln[2]} + 0,1x^5} \quad (5.25)$$

$$Q_3[x] = \frac{C_1 + x^5 \left(\frac{1}{6} \ln[x] + C_0 + \frac{\sqrt{\pi}}{8x} - \frac{1}{9x^2} \right)}{1 - \frac{9}{10C_1} \left(\frac{\pi^{5/2}x}{192} - \frac{x^2}{75} \right) + x^5} \quad (5.26)$$

$$C_0 = \frac{1}{6} \ln[3] + 2C_E - \frac{11}{6} \quad (5.27)$$

$$C_1 = \frac{1}{6} \ln[3] + C_E/2 - \frac{1}{2} \quad (5.28)$$

Grundzustand, Madelung ähnliche und thermische Energien:

$$\epsilon_c = 0,0621814 \left(\ln \left[\frac{r_s}{X[r_s]} \right] + \frac{2b}{Q} \arctan \left[\frac{Q}{Y[r_s]} \right] \right) \quad (5.29)$$

$$- \frac{bx_0}{Z[x_0]} \left(\ln \left[\frac{(\sqrt{r_s} - x_0)^2}{X[r_s]} \right] + \frac{2(b+2x_0)}{Q} \arctan \left[\frac{Q}{Y[r_s]} \right] \right) \quad (5.30)$$

$$X[r_s] = r_s + b\sqrt{r_s} + c \quad (5.31)$$

$$Y[r_s] = 2\sqrt{r_s} + b \quad (5.32)$$

$$Z[x_0] = x_0^2 + bx_0 + c \quad (5.33)$$

$$Q = \sqrt{4c - b^2} \quad (5.34)$$

$$x_0 = -0,10498 \quad (5.35)$$

$$b = 3,72744 \quad (5.36)$$

$$c = 12,9352 \quad (5.37)$$

Chemisches Potential:

$$g_{ee}^c = - \frac{s_0 \Gamma^{3/2} - a_2 \Gamma^6 (\mu_c[r_s, 0] + \Delta\mu_c[r_s, \tau]) / \tau}{1 + s_1 \Gamma^{3/2} + a_2 \Gamma^6} \quad (5.38)$$

$$s_0 = \frac{3}{2}a_0 + \frac{1}{3}\Gamma \frac{da_0}{d\Gamma} \quad (5.39)$$

$$s_1 = \frac{8}{9}a_1 \quad (5.40)$$

$$\Delta\mu_c = \frac{3}{2}\Delta\epsilon_c \quad (5.41)$$

$$\mu_c[r_s, 0] = \epsilon_c[r_s, 0] - \frac{r_s}{dr_s} \frac{d\epsilon_c[r_s, 0]}{dr_s} \quad (5.42)$$

Die Abbildung 5.6 zeigt f_{ee}^c , g_{ee}^c und p_{ee}^c und wie selbstkonsistent die Größen zueinander passen. Dazu wurde der Druck einmal aus der Ableitung ($p_{ee}^{c,abl}$) von f_{ee}^c und einmal aus der Differenz ($p_{ee}^{c,diff}$) $f_{ee}^c - g_{ee}^c$ berechnet. Dargestellt ist die relative Abweichung von ($p_{ee}^{c,abl}$) zu ($p_{ee}^{c,diff}$). Im Gegensatz zu den Idealbeiträgen sind die Ableitungen der Padéformeln nach der Dichte ungenau. Der Wechselwirkungsbeitrag ist vor allem hin zu kleinen Temperaturen und großen Dichten relevant. Dieser Beitrag ist mitverantwortlich für das Auftreten negativer Drücke und eines abnehmenden chemischen Potentials mit zunehmender Dichte.

Proton-Proton Wechselwirkungsanteil

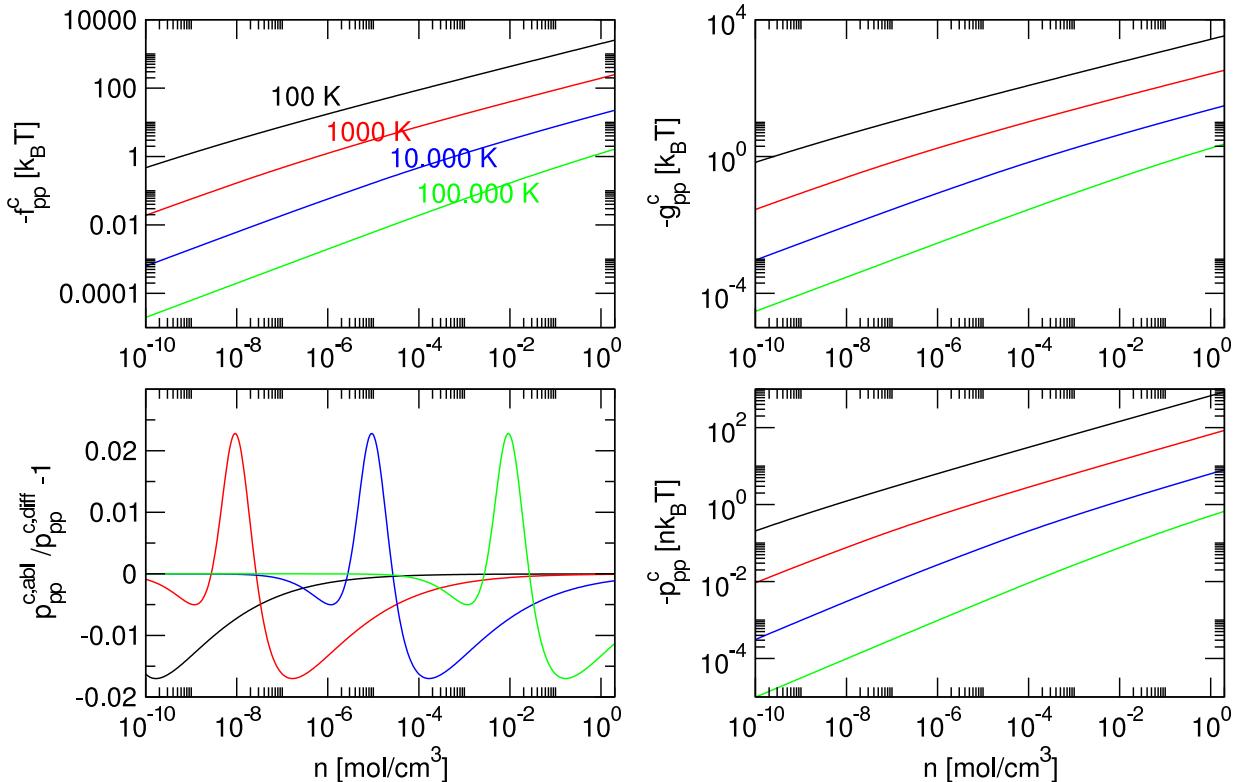


Abbildung 5.7: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für den Proton-Proton Wechselwirkungsbeitrag dargestellt.

Der Proton-Proton Wechselwirkungsanteil ist

$$f_{pp}^c = -\frac{b_0 \Gamma^{3/2} (1 + b_3 \Gamma^{3/2} (\ln[\Gamma] + B_0)) + b_2 \Gamma^6 \epsilon_{ii}[\Gamma]}{1 - b_1 \Gamma^3 (\ln[\Gamma] + B_1) + b_2 \Gamma^6}. \quad (5.43)$$

$$b_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (5.44)$$

$$b_1 = \frac{9}{8} \quad (5.45)$$

$$b_2 = 100 \quad (5.46)$$

$$b_3 = \frac{3\sqrt{3}}{8} \quad (5.47)$$

$$B_0 = \frac{2}{3} \left(2C_E + \frac{3}{2} \ln[3] - \frac{11}{6} \right) \quad (5.48)$$

$$B_1 = \frac{2}{3} \left(2C_E + \frac{1}{2} \ln[3] + \ln[4] - \frac{17}{6} \right) - 0,4765 \quad (5.49)$$

$$g_{ii}^c = -\frac{\frac{\sqrt{3}}{2}\Gamma^{3/2} \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{2}\Gamma^{3/2} (\ln[\Gamma] + B_0 + \frac{1}{6}) \right) + 100\Gamma^6 \mu_{ii}[\Gamma]}{1 - \frac{15}{8}\Gamma^3 (\ln[\Gamma] + B_1 + \frac{2}{15}) (1 + \frac{3}{4}\Gamma^{3/2}) + 100\Gamma^6} \quad (5.50)$$

$$\mu_{ii}[\Gamma] = \epsilon_{ii}[\Gamma] + \frac{\Gamma}{3} \frac{d\epsilon_{ii}[\Gamma]}{d\Gamma} \quad (5.51)$$

$$\epsilon_{ii}[\Gamma] = \begin{cases} 0,899172\Gamma + 0,274823 \ln[\Gamma] - 1,864179\Gamma^{0,323064} + 1,4018 & \text{für } \Gamma < 178 \\ 0,895929\Gamma - \frac{3}{2} \ln[\Gamma] + 3,9437\Gamma^{-1} + 1245\Gamma^{-2} + 1,1703 & \text{für } \Gamma \geq 178 \end{cases} \quad (5.52)$$

Die Abbildung 5.7 zeigt ein systematisches und einigermaßen konsistentes Verhalten der Größen f_{pp}^c , g_{pp}^c und p_{pp}^c

Proton Quantenkorrekturbeitrag

Der Proton Quantenkorrekturbeitrag ist

$$f_{pp}^{cq} = 3 \left(q_0[t] + z_4 q_4[t] - \frac{3t}{4\Gamma} z_5 q_5[t] + z_6 q_6[t] \right). \quad (5.53)$$

$$t = \frac{1}{2\sqrt{R_s}}\Gamma \quad (5.54)$$

$$R_s = \frac{m_i e^2}{\hbar^2} \left(\frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3} \text{Verhältnis des Wigner-Seitz-Radius zum Bohr-Radius} \quad (5.55)$$

$$q_0[t] = \ln \left(\frac{\sinh[t]}{t} \right) \quad (5.56)$$

$$q_4[t] = \frac{1}{4} - \frac{t}{8} \coth[t] - \frac{t^2}{8 \sinh[t]^2} \quad (5.57)$$

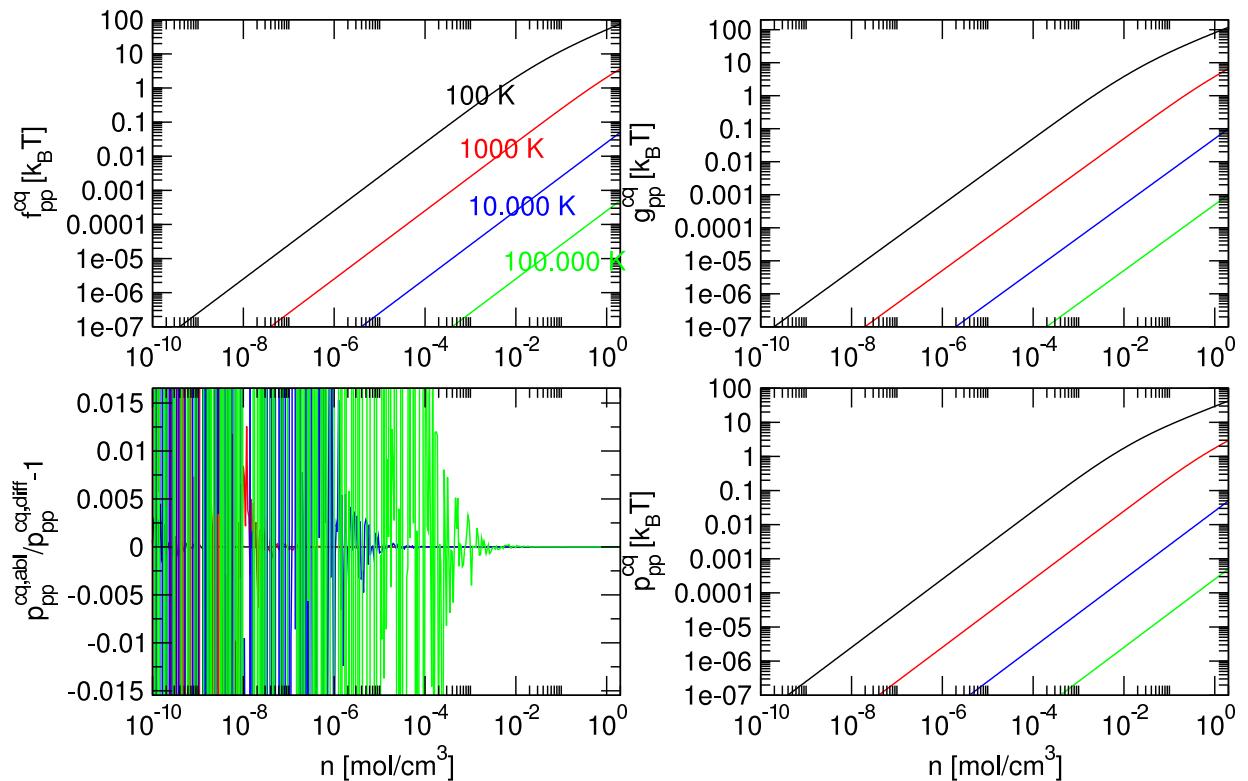


Abbildung 5.8: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für den Proton Quantenkorrekturbeitrag dargestellt.

$$q_5[t] = \frac{t}{3} \coth[t]^2 - \frac{3}{2} \coth[t] - \frac{5}{6} t \frac{1}{\sinh[t]^2} + \frac{2}{t} \quad (5.58)$$

$$q_6[t] = -\frac{1}{6} + \frac{t}{16} \coth[t] + \frac{t^2}{16 \sinh[t]^2} \left(1 + \frac{2t}{3} \coth[t] \right) \quad (5.59)$$

$$z_4 = 0,827702 \quad (5.60)$$

$$z_5 = 1,131 \quad (5.61)$$

$$z_6 = 0,55045 \quad (5.62)$$

$$p_{ii}^{cq} = \frac{3}{2} t \left(q'_0[t] + z_4 q'_4[t] + z_6 q'_6[t] - \frac{3t}{4\Gamma_i} z_5 q'_5[t] \right) - \frac{3t}{8\Gamma_i} z_5 q_5[t] \quad (5.63)$$

$$g_{ii}^{cq} = p_{ii}^{cq} + f_{ii}^{cq} \quad (5.64)$$

Die Abbildung 5.8 zeigt ein systematisches Verhalten. Die Größen sind auch konsistent bei großen Dichten. Die starken Abweichungen der beiden Druckberechnungsarten bei kleinen Dichten sind nicht von Bedeutung, da dort der Beitrag ohnehin verschwindet.

Proton-Elektron Wechselwirkungsbeitrag

Der Proton-Elektron Wechselwirkungsbeitrag ist

$$f_{pe}^c = -\frac{c_0 \Gamma^{3/2} + c_2 \Gamma^{5/2} \epsilon_{ie}[r_s, \Gamma] + c_3 c_4 \Gamma^{5/2}}{1 + c_1 \Gamma^{3/2} + c_2 \Gamma^{5/2} + c_3 \Gamma^{5/2}}. \quad (5.65)$$

$$c_0 = \frac{2^{3/2} - 2}{\sqrt{3}} \quad (5.66)$$

$$c_1 = \frac{3}{2c_0} \frac{\sqrt{\tau\pi}}{8} \quad (5.67)$$

$$c_2 = r_s^{-7/4} \quad (5.68)$$

$$c_3 = 0,01 \quad (5.69)$$

$$c_4 = 1,772\Gamma \quad (5.70)$$

$$\epsilon_{ie}[r_s, \Gamma] = 12^{2/3} \pi^{-5/3} \Gamma r_s (\epsilon_{ie}^0[r_s, \Gamma] + x^2 J[\Gamma]) \quad (5.71)$$

$$\epsilon_{ie}^0 = \frac{A + C/\Gamma}{1 + 0,089r_s^2} + \frac{B\Gamma^{-3/4}}{1 + 0,35325\Gamma^{-1/4}} \quad (5.72)$$

$$x = 0,0140047/r_s \quad (5.73)$$

$$J[\Gamma] = 0,001445 + 0,19928\Gamma^{-3/4} + 0,07338/\Gamma \quad (5.74)$$

$$A = 0,057930 \quad (5.75)$$

$$B = 0,97112 \quad (5.76)$$

$$C = -0,34311 \quad (5.77)$$

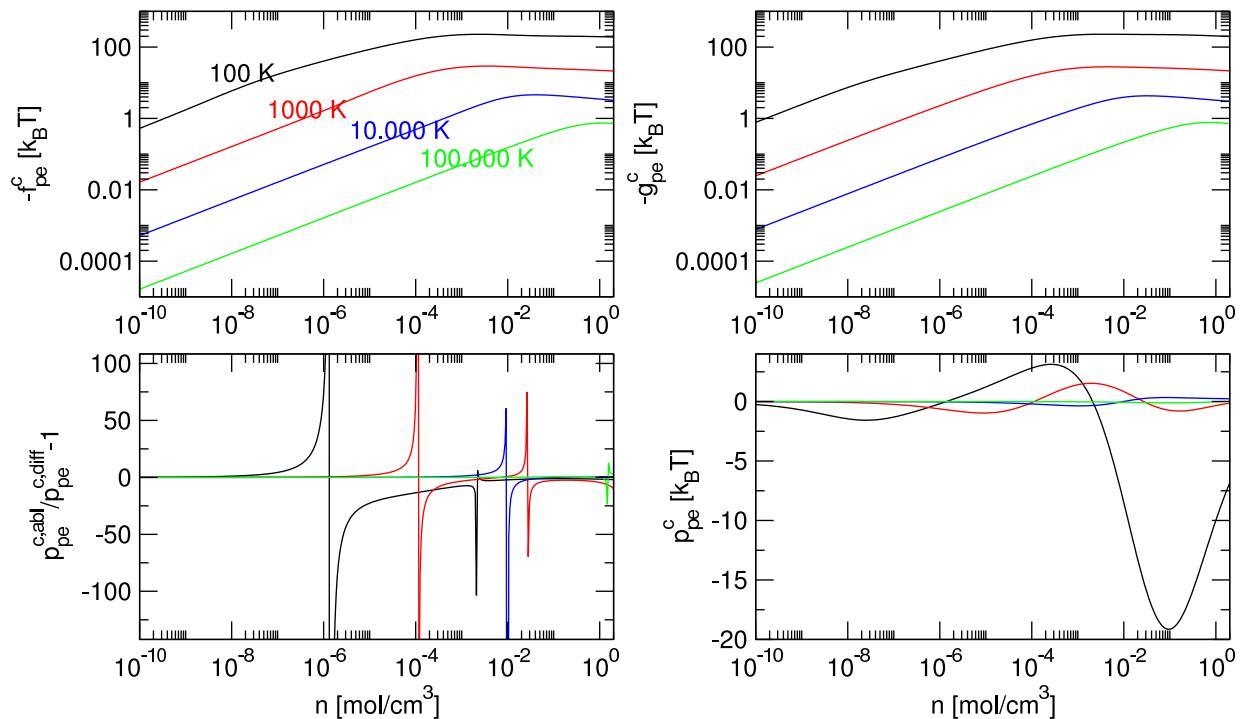


Abbildung 5.9: In den Ausschnitten befinden sich von links nach rechts und oben nach unten: Die freie Energie f , das chemische Potential g , der Fehler im Druck $p^{abl}/p^{diff} - 1$ und der Druck p . In dieser Abbildung sind die jeweiligen Größen für den Proton-Elektron Wechselwirkungsbeitrag dargestellt.

$$g_{ie}^c = -\frac{\frac{3}{2}c_0\Gamma^{3/2} + c_2\Gamma^{5/2}(\epsilon_{ie} + \frac{1}{3}(h_{ie} - d_{ie})) + c_3c_4\Gamma^{5/2}}{1 + c_1\Gamma^{3/2} + (c_2 + c_3)\Gamma^{5/2}} \quad (5.78)$$

$$h_{ie} = \Gamma \frac{\partial \epsilon_{ie}}{\partial \Gamma} \quad (5.79)$$

$$d_{ie} = r_s \frac{\partial \epsilon_{ie}}{\partial r_s} \quad (5.80)$$

Die Abbildung 5.9 zeigt ein systematisches Verhalten von f_{pe}^c und g_{pe}^c . Beim Druck finden wir ein ausgeprägtes Verhalten, das wegen der starken Änderungen problematisch ist für eine Verwendung in einem partiell ionisierten Plasma. Der Beitrag ist mitverantwortlich für ausgeprägte negative Drücke in dem Dichte- und Temperaturbereich, in dem Wasserstoff ein neutrales Fluid ist.

5.2 Ergebnisse der Padénäherung

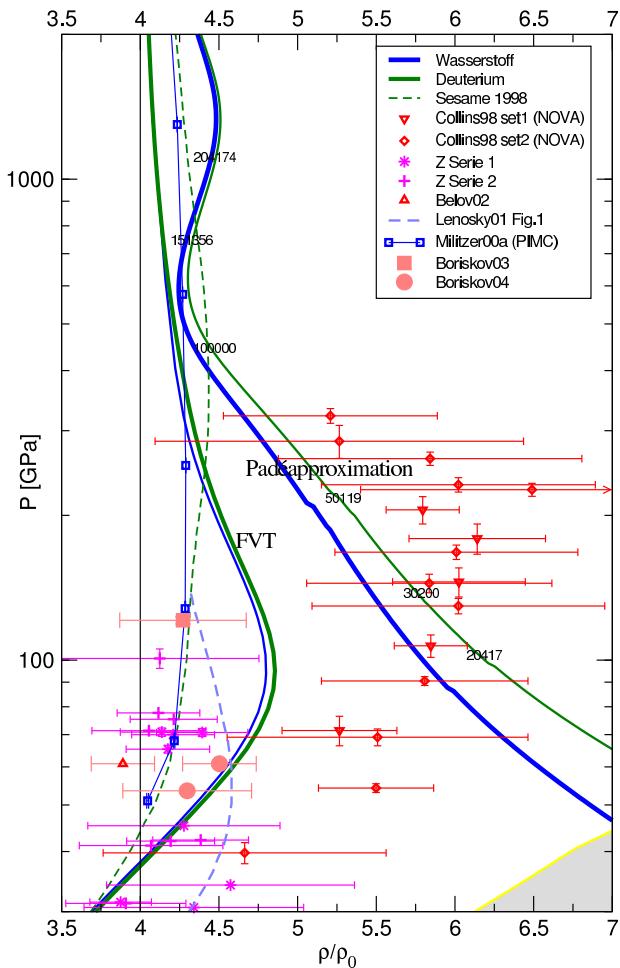


Abbildung 5.10: Hugoniotkurve. Gezeigt wird die Grenze für die maximale Kompression eines idealen Gases bei $\rho/\rho_0 = 4$ und die Experimente und Kurven aus Abbildung 4.13. Zusätzlich wird die Hugoniotkurve für die Padénäherungen gezeigt. In grün für Deuterium und in blau für Wasserstoff.

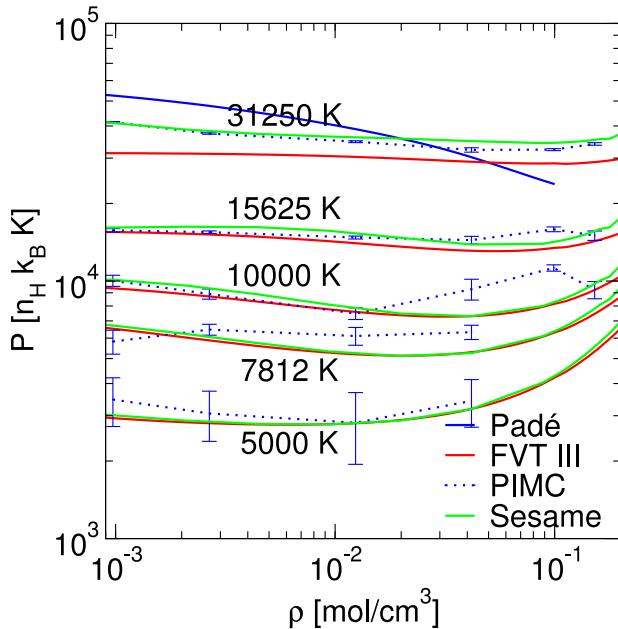


Abbildung 5.11: Druckisothermen. Gezeigt wird mit der blauen Kurve das Ergebnis der Padénäherungen bei 31250 K. Die anderen Kurven entsprechen der Abbildung 4.11.

Mit den Padénäherungen für das vollständig ionisierte Elektron-Proton-Plasma erhalten wir eine gute Übereinstimmung mit den Nova Laserdaten von Cauble (1999) bei Drücken oberhalb von 1 Mbar, so wie es die Abbildung 5.10 zeigt. In diesem Bereich kann eine vollständige Ionisation erwartet werden. Eine Übereinstimmung wäre daher durchaus plausibel. Ein Vergleich mit den Reflektivitätsdaten z.B. von Celliers u. a. (2000) könnte hier Aufschluss geben. Die gute Übereinstimmung der FVT mit den Experimenten unterhalb 1 Mbar spricht für eine Kombination der Zustandsgleichungen für das vollständig ionisierte Plasma, den Padénäherungen, und für das neutrale Fluid, der FVT.

Abbildung 5.11 zeigt das Verhalten der Padénäherungen bei 31250 K. Bei Dichten unterhalb $10^{-2} \text{ mol}/\text{cm}^3$ sind die Wechselwirkungsterme noch nicht dominant. Eine einfache lineare Mischung zwischen FVT und Padénäherungen würden zu den Werten von PIMC und Sesame führen. Bei höheren Dichten lässt sich bereits das lineare Mischungsprinzip nicht mehr anwenden. Die resultierenden Drücke wären deutlich zu klein. Wie wir in Abbildung 6.5 sehen werden, erhalten wir hier auch keine günstigen Resultate beim Abgleich der chemischen Potentiale zwischen FVT und Padénäherungen.

Kapitel 6

Partiell ionisiertes Plasma

Wir betrachten ein neutrales System und ein vollständig ionisiertes Plasma, aus denen sich das Wasserstoffmedium zusammensetzt. In gleicher Weise setzen wir die Zustandssumme zusammen. Die resultierende freie Energie f ergibt sich dann zu:

$$f = \frac{n_0}{n} f_0 + \frac{n_1}{n} f_1 + f_{0-1}^c \text{ gesamte freie Energie} \quad (6.1)$$

$$f_0 : \text{freie Energie des neutralen Systems aus Atomen und Molekülen} \quad (6.2)$$

$$f_1 : \text{freie Energie des Plasmas aus Elektronen und Protonen} \quad (6.3)$$

$$f_{0-1}^c : \text{Wechselwirkungsterme zwischen neutralem System und Plasma} \quad (6.4)$$

$$n = n_0 + n_1 : \text{Gesamtteilchendichte} \quad (6.5)$$

$$n_0 = n_H + 2n_{H_2} : \text{Teilchendichte der neutralen Teilchen} \quad (6.6)$$

$$n_H : \text{Teilchendichte der Atome} \quad (6.7)$$

$$n_{H_2} : \text{Teilchendichte der Moleküle} \quad (6.8)$$

$$n_1 = n_i = n_e : \text{Teilchendichte der Ionen bzw. der freien Elektronen} \quad (6.9)$$

Für das neutrale Systems berücksichtigen wir Atome und Moleküle. Dieses System haben wir im Kapitel 4 behandelt. Im Plasma kommen Elektronen und Ionen vor. Sie sind im Kapitel 5 behandelt worden. Den Wechselwirkungsterm f_{0-1}^c behandeln wir in diesem Abschnitt. Vor den einzelnen freien Energiebeiträgen stehen jeweils Vorfaktoren mit der Teilchendichte. Die einzelnen Energieterme beziehen sich auf die Teilchenzahl des jeweiligen Teilsystems. Die Vorfaktoren rechnen lediglich den angegebenen Energieterm auf die (neue) Gesamtteilchenzahl um.

In den beiden vorangehenden Kapiteln behandelten wir das neutrale System aus Atomen und Molekülen und das Plasma aus Elektronen und Ionen getrennt voneinander. Interessant ist der Dichte- und Temperaturbereich, in dem beides erwartet wird. Wir kombinieren sie und ergänzen sie um Terme, die die gegenseitige Beeinflussung berücksichtigen:

$$f_{0-1}^c = f^{pol} + f^{red} \quad (6.10)$$

f_{0-1}^c ist der Term aus Gleichung 6.1, der genau diese Terme repräsentiert. Wir berücksichtigen das reduzierte Volumen der Elektronen und Ionen durch die Atome und Moleküle.

Es trägt wesentlich zur Druckionisation bei höheren Dichten bei. Und wir behandeln die Polarisation, die für eine um Größenordnungen höhere Ionisation bei sehr kleinen Ionisationsgraden sorgt. Dies ist für die Thermodynamik zwar unbedeutend, für die Leitfähigkeiten ist sie jedoch der entscheidende Beitrag, da sie den Ionisationsgrad bestimmt.

6.1 Reduziertes Volumenkonzept

Eine gegenseitige Beeinflussung der Elektronen und Protonen mit den Atomen und Molekülen röhrt aus dem geringeren Volumen für die Elektronen und Protonen. Die Punktteilchen sollen nicht in den Phasenraum der Atome und Moleküle eindringen können. Das Volumen der Punktteilchen ist also um das Volumen der Atome und Moleküle kleiner. Genau diese Aussage erhalten wir, wenn wir in dem harte Kugel - Term der FVT Punktteilchen hinzufügen. Wir erhalten dann, wie in [Ebeling \(1985\)](#) ausgeführt ist, den Zusatzterm:

$$f^{red} = -\frac{n_e + n_i}{n} \ln[1 - \eta] \quad (6.11)$$

Dieser Term ist identisch mit dem Ersetzen der Dichte in den klassischen Idealanteilen der Elektronen und Protonen durch die reduzierte Dichte $n_e^* = n_e/(1 - \eta)$. Dabei ist η genau der durch die neutralen Teilchen besetzte Volumenanteil. [Kahlbaum und Förster \(1992\)](#) schlagen vor, das reduzierte Volumen auch in die Idealteile des Fermigases einzusetzen und so für die Beschreibung des Elektronengases zu verwenden. Dieses wird nahe gelegt, weil dadurch die gleichen Relationen zwischen den Idealteilen des chemischen Potentials, der freien Energie und des Drucks erhalten bleiben, so wie sie im klassischen Fall gültig sind.

6.2 Polarisierung

Die Anwesenheit der geladenen Elektronen und Protonen polarisieren die neutralen Atome und Moleküle. Basierend auf der Arbeit von [Ebeling u.a. \(1988\)](#) berechnen wir den Polarisationsterm mit dem von [Redmer und Röpke \(1985\)](#) abgeleiteten Polarisationspotential:

$$f^{pol} = 2 \left(\frac{n_A n_i}{n} B_{Ai}[n_i, T] + n_A n_e B_{ae}[n_e, T] \right) \quad (6.12)$$

$$B_{Ae}[n_e, T] = 2\pi \int_{R_A}^{\infty} r^2 (1 - \exp[-V[r, R_A]/(k_B T)]) dr \quad (6.13)$$

$$B_{Ai}[n_i, T] = 2\pi \int_{R_A + R_i}^{\infty} r^2 (1 - \exp[-V[r, R_A + R_i]/(k_B T)]) dr \quad (6.14)$$

$$V[r, R] = -\frac{\varepsilon^2 \alpha_p}{2} \left(\frac{1 + r\kappa}{r^2 + R^2} \right)^2 e^{-2r\kappa} \quad (6.15)$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{4\pi n_e \varepsilon^2}{k_B T}} \quad (6.16)$$

α_p : Polarisierbarkeit

6.3 Zustandssumme der Atome

Bei der Kombination der Ausdrücke f_0 und f_1 des neutralen Fluids mit dem vollständig ionisierten Plasma trat im Gegensatz zu den Arbeiten von Haronska u. a. (1987); Ebeling und Richert (1985) nur eine schwache Druckionisation auf. Der wesentliche Unterschied ist die Verwendung effektiver Paarpotentiale statt eines harten Kugelpotentials. Harte Kugelpotentiale haben den Vorteil, eine Grenzdichte zu besitzen, bei der das chemische Potential unendlich groß wird. Wächst also die Gesamtdichte an, so entsteht allein dadurch eine Druckionisation, weil die Dichten des neutralen Systems nicht größer als die Grenzdichten werden kann und demzufolge nur noch die Dichte des vollständig ionisierten Plasmas größer werden kann.

Das reduzierte Volumenkonzept kommt als weitere Möglichkeit in Frage, zur Druckionisation beizutragen. Dies funktioniert nur dann, wenn dieser Ausdruck nicht in die FVT einbezogen wird. Andernfalls würde er zur Minimierung der freien Energie beitragen und in der Ableitung verschwinden. Die verbleibenden anderen Anteile für das chemische Potential der Atome μ_H und der Elektronen und Protonen $\mu_e + \mu_p$ tragen identisch bei und heben sich daher auf bzw. verschwinden ohnehin bei kleinen Dichten des neutralen Systems als $\ln[1 - \eta]$ Ausdruck. Übrig bleibt bei sehr kleinen Atomdichten n_H ein Ausdruck $k_B T \pi / 3 d_H^3 n_e$ in μ_H . Selbst bei konstantem Atomdurchmesser d_H wächst dieser Ausdruck nur linear mit der Dichte, die in diesem Fall als identisch mit n_e betrachtet werden kann. Demgegenüber wächst das chemische Potential der Elektronen μ_e als Fermigas mit zunehmender Dichte deutlich stärker als linear. Die Folge: Mit zunehmender Dichte fällt der Ionisationsgrad wieder. Das chemische Gleichgewicht $\mu_H = \mu_e + \mu_p$ wird über die starken Wechselwirkungsanteile des atomaren Systems bei hohen Dichten hergestellt.

Ein weiterer Ansatz zum Erreichen einer ausgeprägten Druckionisation bietet die elektronische Zustandssumme der Atome. Diese wird über die Planck (1925); Brillouin (1932); Larkin (1960) Zustandssumme σ_{PBL} berücksichtigt. Mit ihr lassen sich erst die chemischen Potentiale gleichsetzen: $\mu_H = \mu_e + \mu_p$. Dies liefert bei kleinen Dichten der freien Elektronen und Protonen gute Ergebnisse. Bei großen Dichten liegt eine Reduzierung der elektronischen Zustände nahe. Wir haben deshalb im Abschnitt 4.1 einen Ausdruck im chemischen Potential analog zu Kerley (1972b) eingeführt, der mit zunehmender Elektronendichte die Zustandssumme reduziert. Wir wiederholen den Ausdruck:

$$\sigma_{PBL} = 4 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 \left(\exp \left[\frac{I_0}{s^2 k_B T} \right] - 1 - \frac{I_0}{s^2 k_B T} \right) \quad (6.18)$$

$$f_H^{el} = -\ln[\sigma_{PBL}] - \ln \left[\frac{2}{2e^{\alpha y} - 1} \right] \quad (6.19)$$

$$\alpha = 1,209 \quad (6.20)$$

$$y = \left(\frac{n_e \Lambda_e^3}{2} \right)^{2/3} \quad (6.21)$$

Dadurch wird die elektronische Zustandssumme f_H^{el} dichteabhängig.

f_H^{el} führt zu einer Zusammensetzung mit Druckionisation. In den Padénäherungen für das vollständig ionisierte Plasma und in f_H^{el} stoßen wir auf starke negative Beiträge im Druckanteil genau in dem Dichtebereich, in dem in gleicher Größenordnung sowohl neutrale Atome und Moleküle vorkommen als auch Elektronen und Protonen. Hier kommt zum Tragen, dass die Padénäherungen bereits Beiträge von Bindungszuständen enthalten, die zusammen mit f_H^{el} zu hoch gewertet werden. Wir sind daraufhin dazu übergegangen, für das vollständig ionisierte Plasma nur die Idealbeiträge der Elektronen und Protonen mitzunehmen und den resultierenden Druckanteil aus f_H^{el} entfallen zu lassen. Daraus resultieren sehr gute Übereinstimmungen mit den Experimenten und eine Zustandsgleichung ohne Plasmaphasenübergang, die wir in den folgenden Abbildungen vorstellen. Offensichtlich liegen zusätzliche positive Druckbeiträge aus der Coulombwechselwirkung in der gleichen Größenordnung wie die negativen Druckbeiträge aus der dichteabhängigen elektronischen Zustandssumme der Atome. Insofern rechtfertigt dieses ein Weglassen der Druckbeiträge aus f_H^{el} und den Verzicht auf die Padénäherungen.

6.4 Ergebnisse

In der Abbildung 6.1 zeigen wir die Massen- und Druckanteile des partiell ionisierten Wasserstoffs bei zwei verschiedenen Temperaturen. Benutzt wurde die Fluid Variational Theory zur Beschreibung der Atome und Moleküle und die Ausdrücke des idealen Gases zur Beschreibung der Elektronen und Protonen, so wie es im Abschnitt zuvor beschrieben wurde.

In den oberen beiden Abbildungen zeigen wir die Massenanteile. Bei 10000 K ist gut zu erkennen, wie sich mit zunehmender Dichte Atome und schließlich Moleküle bilden. Bei weiter zunehmender Dichte setzt dann die Druckdissoziation und -ionisation ein. Bei der wesentlich höheren Temperatur von 100000 K treten schließlich überhaupt keine Moleküle mehr auf.

Betrachten wir die unteren beiden Abbildungen mit den Druckanteilen, sehen wir zusätzlich den Beitrag der Elektronen. Besonders zu hohen Dichten hin dominiert deren Beitrag. Zusätzlich kommen noch die Wechselwirkungsbeiträge hinzu. Sie spielen eine entscheidende Rolle um 1 g/cm^3 . Zu sehen sind in türkis, blau und grün die Beiträge zwischen Atomen, Atomen und Molekülen und zwischen Molekülen. Wechselwirkungsbeiträge im Druck zwischen Elektronen und Protonen treten nicht auf; hier haben wir nur die Idealbeiträge benutzt. Beiträge aus dem Polarisationsterm sind zu gering und sind daher nicht sichtbar.

Vergleichen wir die Zustandsgleichung für das partiell ionisierte Plasma mit der FVT für rein neutralen Wasserstoff, werden relativ kleine aber entscheidende Abweichungen zu höheren Dichten, Temperaturen und Drücken deutlich. In Abbildung 6.2 vergleichen wir

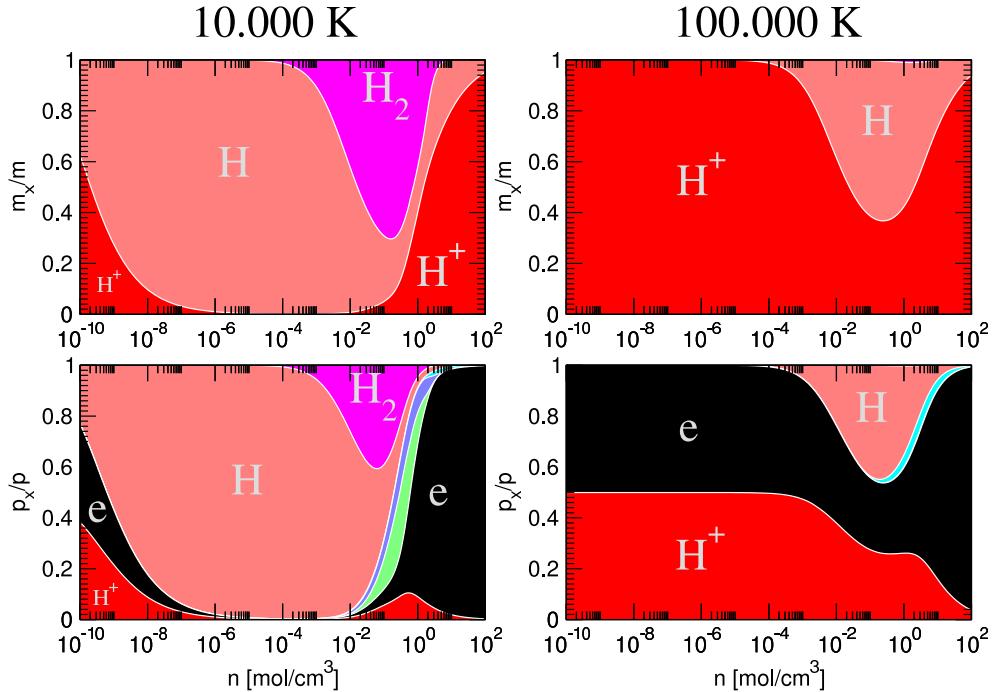


Abbildung 6.1: Aufgetragen ist die auf 1 normierte Summe aus den Beträgen der einzelnen Anteile p_i^j . Dies zeigt deren Bedeutung bei unterschiedlichen Dichten und Temperaturen.

diese beiden Zustandsgleichungen mit Stoßexperimenten. Zu sehen sind die beiden experimentspezifischen Stoßfront- und Kolbengeschwindigkeiten. Die Zustandsgleichung für das partiell ionisierte Plasma stimmt hervorragend mit den Nova-Laser-Experimenten aus Da Silva u. a. (1997) überein. Die Stoßexperimente mit der Z-Maschine aus Knudson u. a. (2003) zeigen eine höhere Stoßfront- und eine niedrigere Kolbengeschwindigkeit. Die gleiche Tendenz weist die Zustandsgleichung für das neutrale Fluid auf. Dieses ist insofern erstaunlich, weil die Rechnungen mit der Pfadintegral-Monte-Carlo-Methode aus Militzer u. a. (2002) die gleiche Tendenz aufweist, obwohl hier der überwiegende Teil freie Elektronen und Protonen sind. Diesem Punkt sind wir weiter nachgegangen. In Abbildung 6.3 haben wir die zu den Stoßfront- und Kolbengeschwindigkeit äquivalente Abbildung Druck über Dichte dargestellt. Zu sehen sind die sogenannten Hugoniotkurven. Die Dichte haben wir geteilt durch die Anfangsdichte aus dem Stoßexperiment. Auf diese Weise lassen sich die Wasserstoffergebnisse mit den Deuteriumergebnissen vergleichen. In blau sind die Wasserstoffhugoniotkurven dargestellt. In grün diejenigen für Deuterium. Deuterium wird im wesentlichen wegen der höheren Masse in der thermischen Wellenlänge stärker kompressibel. Dies kann der Abbildung für alle Zustandsgleichungen entnommen werden. Für Wasserstoff gilt: Am wenigsten kompressibel ist rein neutraler. Dies zeigen die Hugoniotkurven, die mit der FVT berechnet wurden. Am stärksten kompressibel ist das ideale Elektron-Proton-Gas.

Nehmen wir die Wechselwirkungs- und Austauschterme der Padénäherungen mit, er-

halten wir eine Hugoniotkurve, die bei hohen Drücken in die Kurve des idealen Elektron-Proton-Gases übergeht. Wegen der fehlenden Beschreibung der Atome und Moleküle werden hin zu kleinen Drücken die Padénäherungen völlig unphysikalisch: Sie schneiden sogar die 0 K Isotherme. Sie stimmen allerdings beachtlich gut mit den Nova-Laserexperimenten im oberen Druckbereich überein. Dort ist ein hoher Ionisationsgrad zu erwarten. Eine besonders gute Übereinstimmung mit den Nova-Laserexperimenten zeigt die Zustandsgleichung für das partiell ionisierte Plasma. Hier bleibt die besondere interessante Frage: Warum gibt es eine gute Übereinstimmung zwischen den Pfadintegral-Monte-Carlo Rechnungen und den Z-Maschinenexperimenten und im Gegensatz dazu eine gute Übereinstimmung des chemischen Modells mit den Nova-Laserexperimenten? Hierzu diskutiert [Ross u. a. \(2004\)](#) ob die Z-Maschinenexperimente mit einer ungeeigneten Aluminiumzustandsgleichung behandelt worden sind und [Nellis \(2002\)](#), ob die Nova Laserdaten fehlerhaft sind, weil mögliche Neigungen des Stoßkolbens nicht beachtet worden seien.

Schallgeschwindigkeit

In Abbildung 6.2 zeigen wir die Schallgeschwindigkeit

$$c_s = \sqrt{\left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_S} \quad (6.22)$$

für die FVT und das partiell ionisierte Plasmamodell aus FVT und den Idealbeiträgen der Elektronen und Protonen. Beide stimmen gut überein mit den Messungen der Gaskanonnenexperimente und dem linear Mixing Modell von [Ross \(1998\)](#). Im Vergleich dazu ergibt die Sesame Zustandsgleichung wesentlich höhere Schallgeschwindigkeiten.

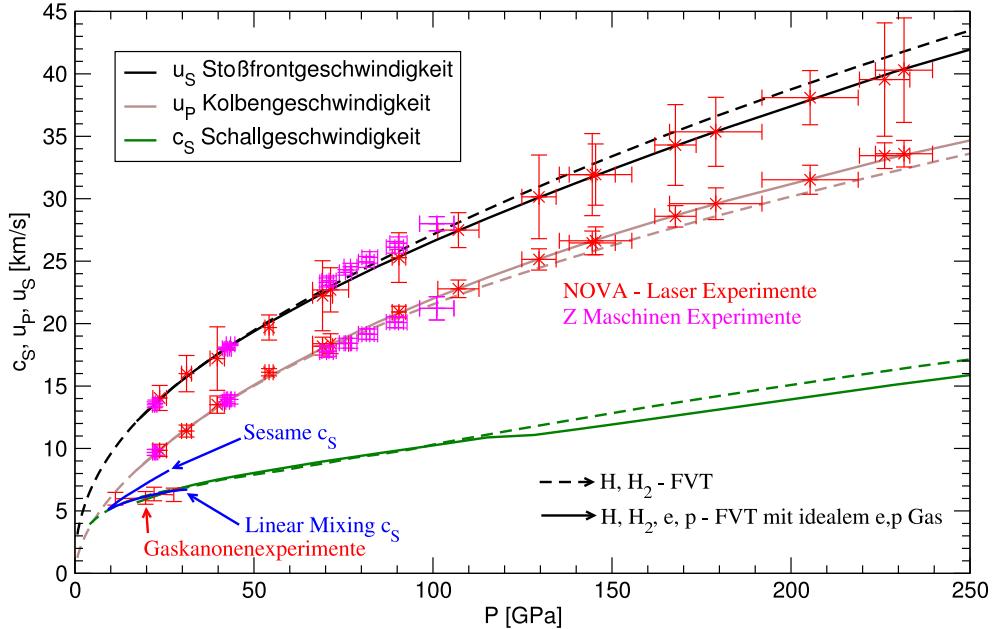
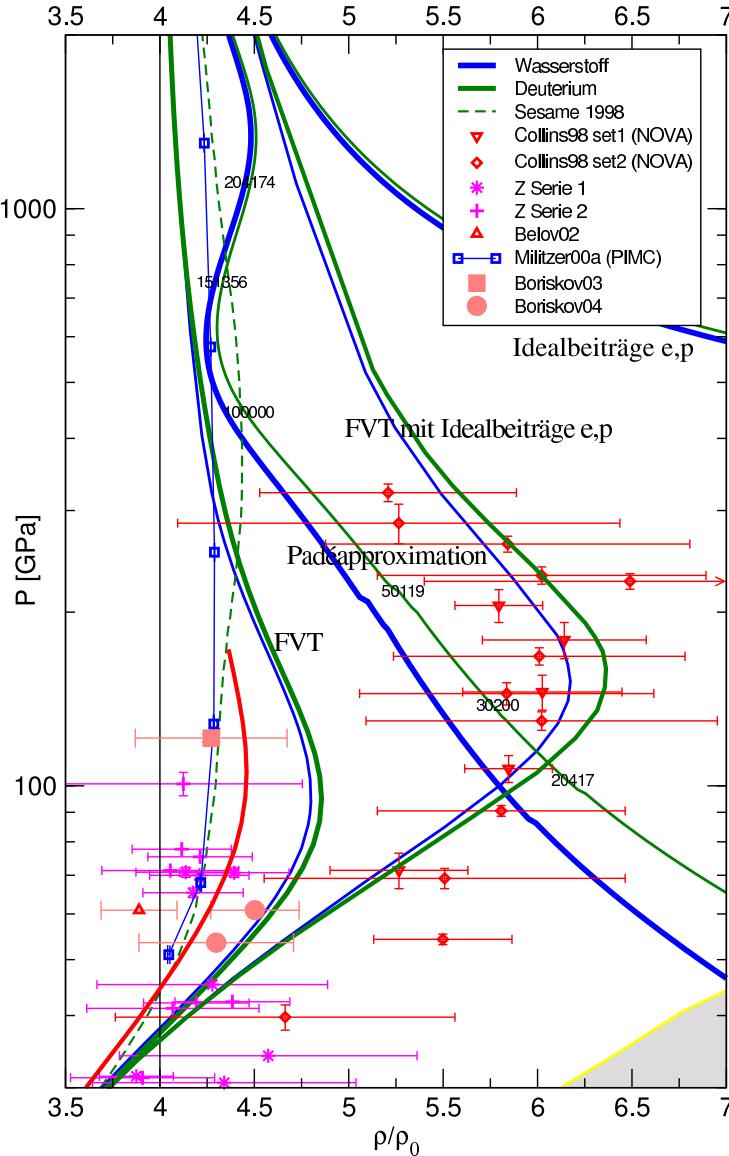


Abbildung 6.2: Auftretende Stoß-, Kolben- und Schallgeschwindigkeit bei einem Stoßexperiment. Gezeigt wird der Unterschied zwischen einem rein neutralen Fluid und dem partiell ionisierten Plasma. Verglichen wird mit den Experimenten aus Da Silva u. a. (1997); Knudson u. a. (2003); Pratesi u. a. (1997); Holmes (2001), siehe dazu auch die Vergleiche bei Clérouin und Dufrêche (2001). Die Fehlerbalken der Nova-Laser-Experimente sind hier wesentlich größer als die tatsächlichen, da sie aus der Druck über Dichtedarstellung entnommen wurden. Eine Umrechnung in diese Darstellung führt zu einer Addition von Fehlern und nicht zu den ursprünglich gemessenen deutlich kleineren. Das Abweichen der Schallgeschwindigkeit bei dem partiell ionisierten Plasma oberhalb von 120 GPa liegt an dem dort größeren Temperaturgitter, auf dem die Geschwindigkeiten berechnet wurden.



7 Abbildung 6.3: Übersicht über die Stoßexperimente und den Hugoniot-kurven.

Experimente

mit Gaskanonen:

\triangleright und \circ Dick und Kerley (1980),

* Holmes u. a. (1995),

mit Laser:

\triangledown und \diamond Collins u. a. (1998),

mit Diamantstempel:

\square Hemley u. a. (1990),

mit Z-Maschine:

* und + Knudson u. a. (2003)

Simulationen:

* Dichte Funktional Theory Lenosky u. a. (1997, 2000) und Desjarlais (2003),

Pfadintegral Monte Carlo Militzer und Ceperley (2000),

Wellenpaketsmolekuldynamik Knaup (2001)

chemische Modelle:

Aktivitätsentwicklung Rogers (2000),

Padénäherung Stolzmann und Blöcker (2000),

Fluid-Variational-Theory Juranek und Redmer (2000),

Linear Mixing Modell Ross (1998),

Saumon und Chabrier (1991, 1992)

Nagao u. a. (2001)

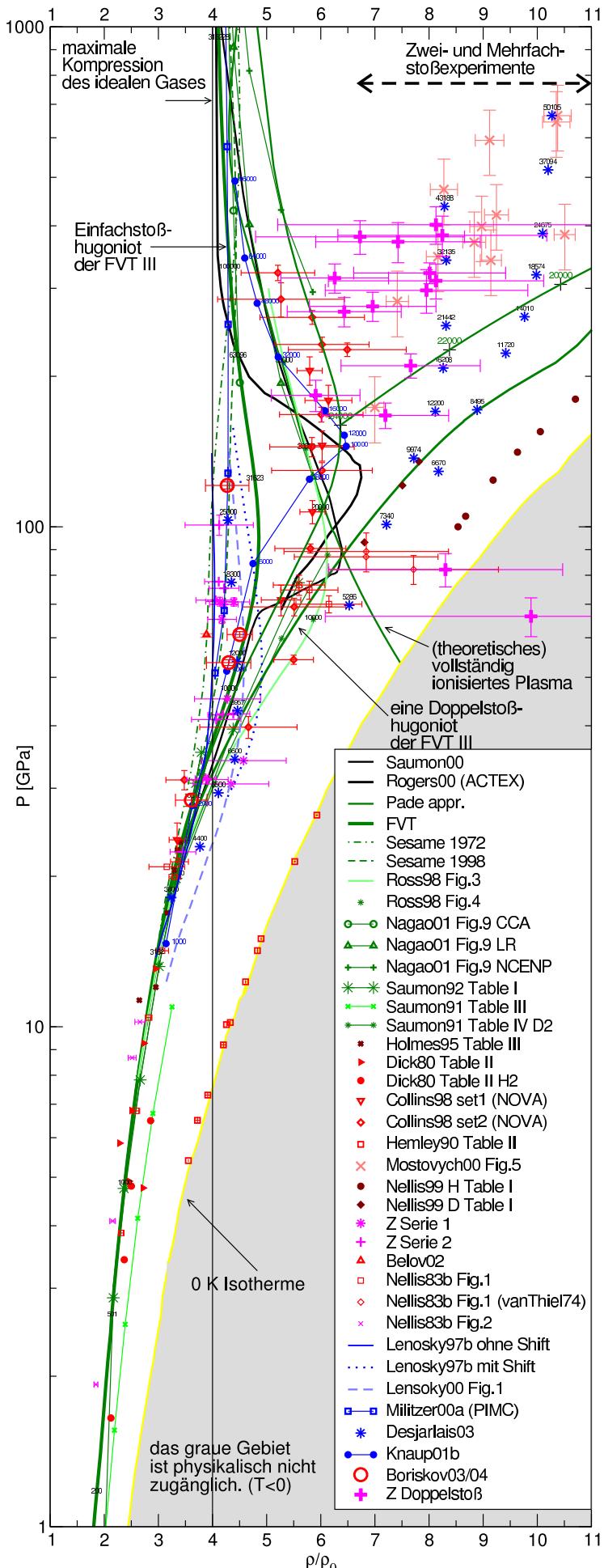


Abbildung 6.4: Übersicht über die Stoßexperimente und den Hugoniotkurven.

Experimente

mit Gaskanonen:

- ▷ und ○ Dick und Kerley (1980),
- * Holmes u. a. (1995),

mit Laser:

- ▽ und ◇ Collins u. a. (1998),

mit Diamantstempel:

- Hemley u. a. (1990),

mit Z-Maschine:

- * und + Knudson u. a. (2003)

Simulationen:

- * Dichte Funktional Theory Lenosky u. a. (1997, 2000) und Desjarlais (2003),

Pfadintegral Monte Carlo Militzer und Ceperley (2000),

Wellenpaketsmolekulardynamik Knaup (2001)

chemische Modelle:

- Aktivitätsentwicklung Rogers (2000),

Padénäherung Stolzmann und Blöcker (2000),

Fluid-Variational-Theorie Juranek und Redmer (2000),

Linear Mixing Modell Ross (1998),

Saumon und Chabrier (1991, 1992)

Nagao u. a. (2001),

Sesame Kerley (1972b, 2003)

gelb: =0 K Isotherme

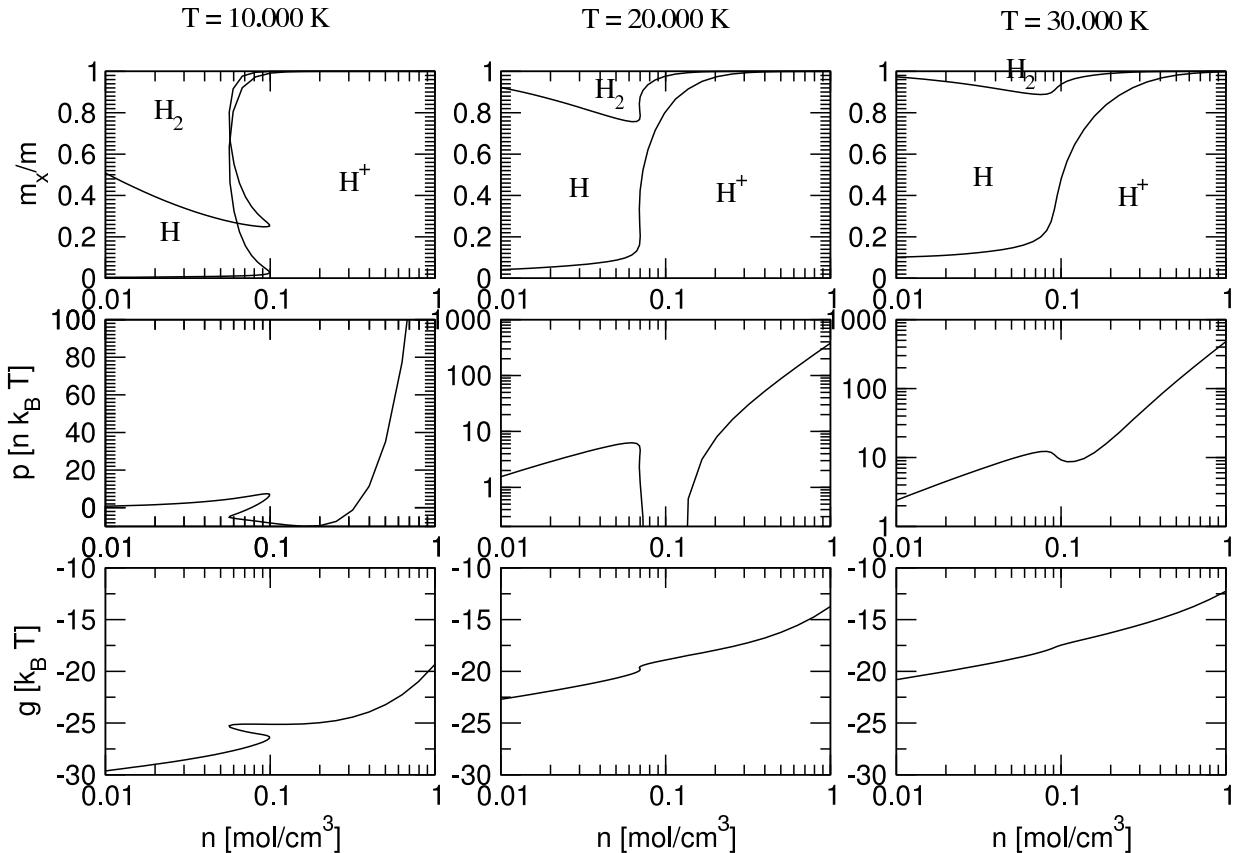


Abbildung 6.5: Thermodynamische Größen im chemischen Gleichgewicht zwischen dem neutralen Fluid und dem vollständig ionisierten Wasserstoff unter Verwendung der FVT und den Padénäherungen. Die Ausschnitte aus der oberen Reihe geben die Massenverhältnisse der einzelnen Sorten wieder. Die Ausschnitte aus der mittleren Reihe zeigen den Druck und aus der unteren das chemische Potential. Alle Darstellungen sind über der gleichen Dichte aufgetragen. In den Ausschnitten der ersten, zweiten und dritten Spalte sind die Größen jeweils nach den Temperaturen 10000 K, 20000 K und 30000 K dargestellt.

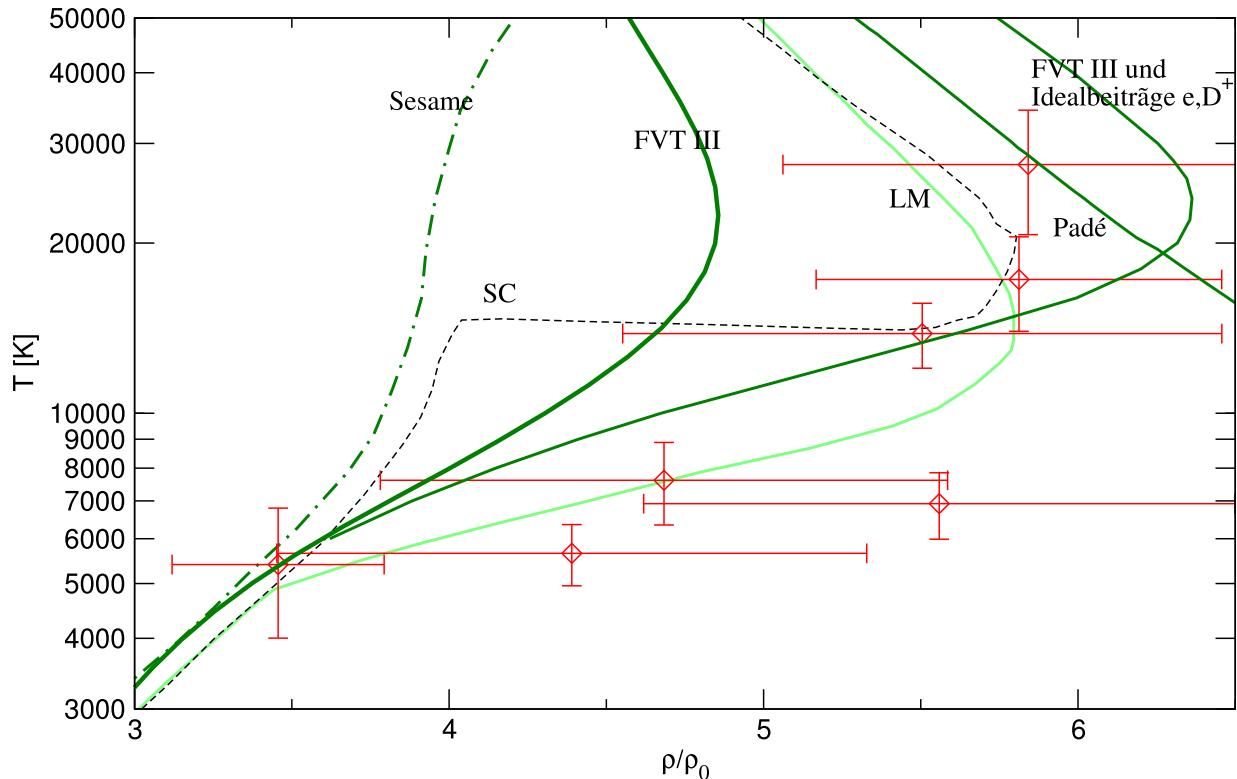


Abbildung 6.6: Hugoniotkurven in der Darstellung Temperatur über Dichte. Dargestellt ist die Sesamekurve von Kerley (1972b), die SC-Kurve von Saumon und Chabrier (1992), die LM-Kurve von Ross (1998) und aus dieser Arbeit die FVT- und Padékurve sowie die Kurve des partiell ionisierten Plasmas aus FVT und den Idealbeiträgen der Elektronen und Deuteronen. Die Experimente stammen von Cauble u. a. (2000) aus Interferometermessungen.

Kapitel 7

Anwendung der EOS-Daten und des Modells

7.1 Modellberechnungen für GSI-Experimente

An den Beschleunigern der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt soll Wasserstoff unter hohen Drücken in einer alternativen Versuchsanordnung untersucht werden. Hierzu wurden von [Tahir u. a. \(2003a\)](#) ein Versuchsaufbau mit einem in Abbildung 7.1 gezeigten mehrschichtigen Zylinder untersucht. Im Innern des Zylinders wird der Wasserstoff eingeschlossen. Mit einem Schwerionenstrahl werden die äußeren Bleischichten erhitzt. Damit verbunden ist eine Art Explosion des Bleimantels, die im Inneren zu einer Implosion führt. Der Wasserstoff wird auf diese Weise stoßkomprimiert. Hierzu wurden vergleichende Rechnungen durchgeführt mit dem Sesame Modell und der Zustandsgleichung bestehend aus der FVT für das neutrale Fluid und den Padénäherungen für das vollständig ionisierte Plasma.

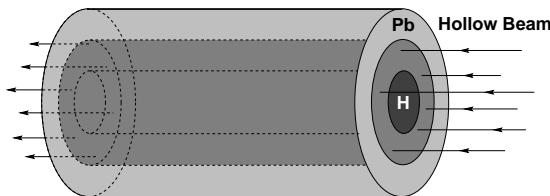


Abbildung 7.1: Mehrschichtiger Zylinder aus Blei schließt die Wasserstoffprobe ein; aus [Tahir u. a. \(2003a\)](#).

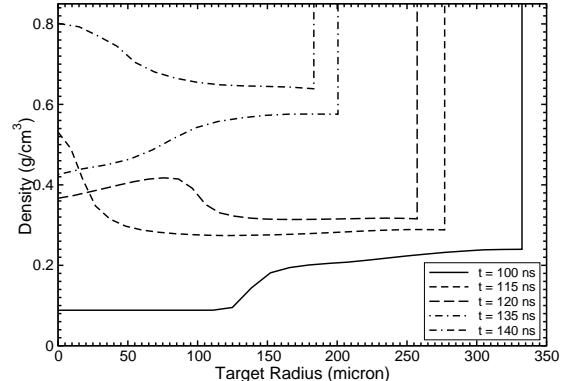


Abbildung 7.2: Veränderung des Dichteprofils während der Stoßkompression aus [Tahir u. a. \(2001b\)](#).

Bereits von [Tahir u. a. \(2001b\)](#) wurde zu diesem Experiment die Zustandsgrößen während des Experimentverlaufs untersucht. Abbildung 7.2 zeigt die Veränderung des Dichte profils entlang des Radius bei verschiedenen Zeiten nach Stoßbeginn.

7.2 Planetenmodelle

Zustandsgleichungen von Wasserstoff werden bei vielen Planetenmodellen benutzt. In sehr vielen Planeten findet sich ein sehr großer Anteil an Wasserstoff. Häufiges Beispiel ist Jupiter mit einem Masseanteil zwischen 62 und 79%. Von [Guillot u. a. \(2004\)](#) wurde der in Abbildung 7.3 gezeigte Aufbau von Jupiter skizziert. Deutlich wird daran, wie bedeutend die Zustandsgleichung ist. Kommt in Jupiter tatsächlich metallischer Wasserstoff vor? Ist er für das Magnetfeld verantwortlich? Hat Jupiter einen Kern mit schweren Elementen? Gibt es ein gleichmäßiges Helium-Wasserstoff-Gemisch oder regnet Helium aus? Dieses sind

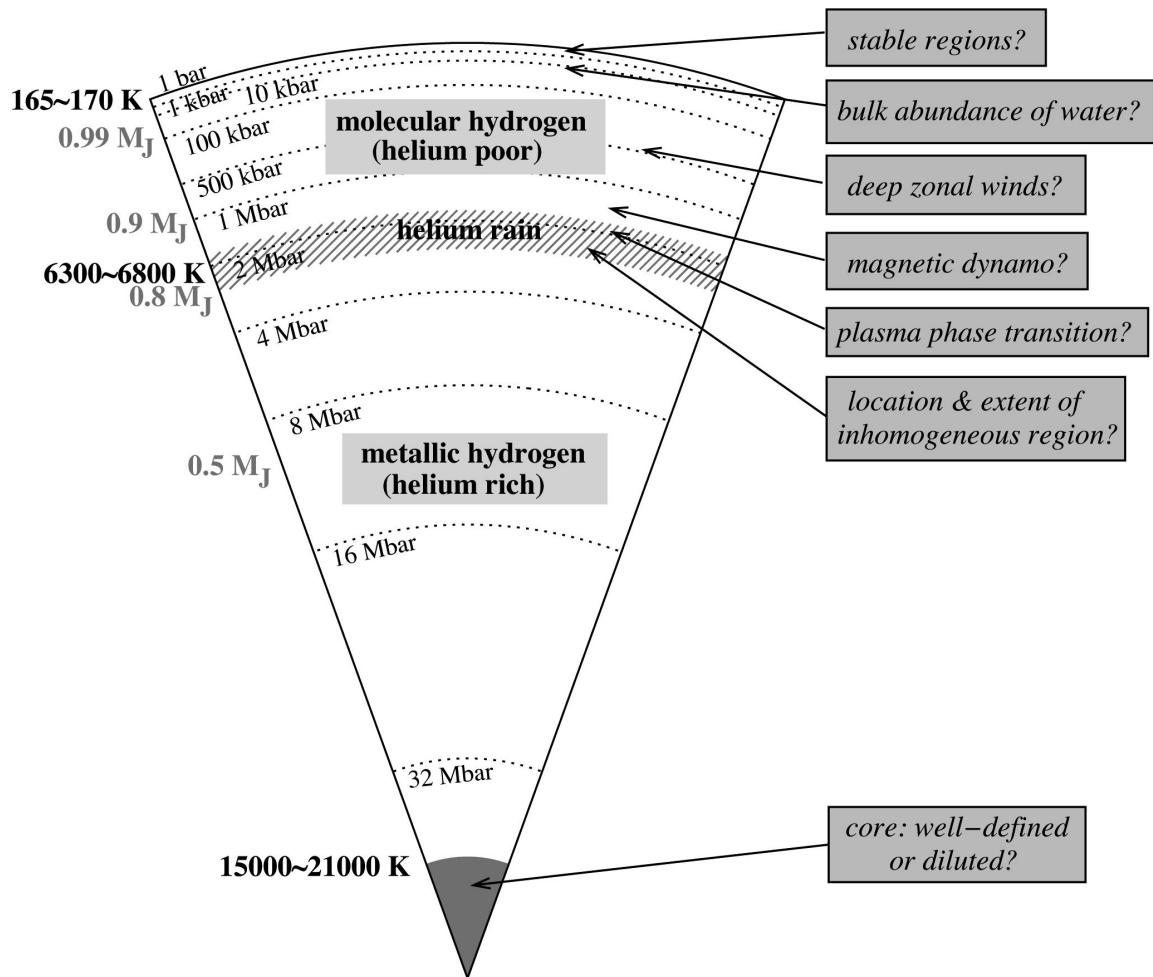


Abbildung 7.3: Querschnitt durch Jupiter aus [Guillot u. a. \(2004\)](#).

alle Fragen, die bis heute noch nicht geklärt sind. [Saumon und Guillot \(2004\)](#) stellen den Nutzen der Stoßexperimente für die Beschreibung von Jupiter und Saturn dar.

Den Aufbau eines Jupiter ähnlichen reinen Wasserstoffplaneten wurden von [Aguilera \(2004\)](#); [Schwarz u. a. \(2004\)](#) mit der hier entwickelten Zustandsgleichung berechnet. Die

Abbildung 7.4 aus Schwarz u. a. (2004) zeigt den Verlauf der Gesamtmasse in Abhängigkeit vom Radius. Verglichen werden die Zustandsgleichungen eines idealen Gases mit der FVT und Sesame Zustandsgleichung. Deutlich werden Unterschiede zwischen FVT und Sesame im Bereich von 10 Erdradien. In diesem Bereich des neutralen Wasserstoffs gibt es offensichtlich Unterschiede. Der Realität am nächsten kommt sogar die Zustandsgleichung des idealen Gases. Sie erreicht die Jupitergesamtmasse bei dem korrekten Radius von 11 Erdradien. Dieses legt bei der speziellen Wasserstoffzustandsgleichung, sei es FVT oder Sesame, einen schweren Kern nahe.

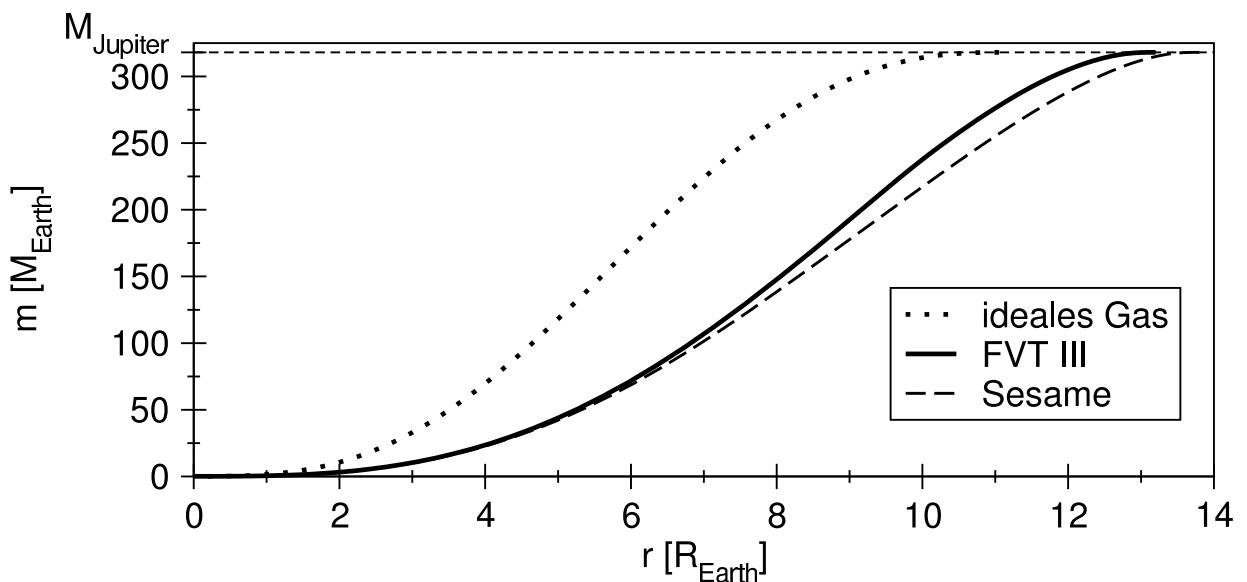


Abbildung 7.4: Dichteprofil von Jupiter mit verschiedenen EOS berechnet; aus Schwarz u. a. (2004).

7.3 Leitfähigkeit

Von Kuhlbrodt und Redmer (2003) wurden die elektrischen Leitfähigkeiten mit den Wasserstoffzustandsdaten berechnet. Grundlage hierfür ist die Lineare Response Theorie nach Zubarev. Die Transportquerschnitte wurden in T-Matrix-Näherung berechnet. Es wurde eine Zustandsgleichung verwendet, die die Fluid Variational Theory für das neutrale Fluid mit den Padénäherungen für das vollständig ionisierte Plasma kombiniert. Der Dichtebereich in denen die Kombination mit den Padéformeln unphysikalisches Verhalten liefert, wurde mit einer Konstruktion für einen Phasenübergang ausgeblendet. In den folgenden Abbildungen ist dies als Instabilitätsgebiet bezeichnet. Die Abbildung 7.3 zeigt den Verlauf der Leitfähigkeit bei verschiedenen Temperaturen. Gezeigt ist die Zimankurve als oberer Grenzwert für die Leitfähigkeit. Verglichen wird mit Experimenten von Weir u. a. (1996); Ternovoi u. a. (1999). Die Experimente fanden überwiegend um etwas 2500 K statt. Zu sehen ist eine deutliche Diskrepanz zwischen der 2500 K Isotherme der hier entwickelten

Zustandsgleichung und den Experimenten. Offensichtlich ist entweder der Ionisationsgrad aus der Zustandsgleichung zu niedrig, oder es gibt einen weiteren Prozess, der die Leitfähigkeit signifikant erhöht.

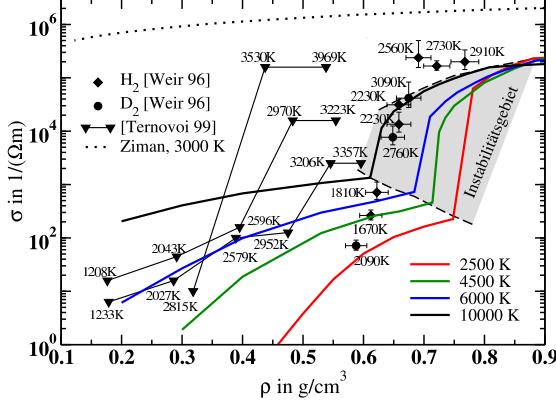


Abbildung 7.5: Elektrische Leitfähigkeit bei verschiedenen Temperaturen aus [Kuhlbrodt und Redmer \(2003\)](#).

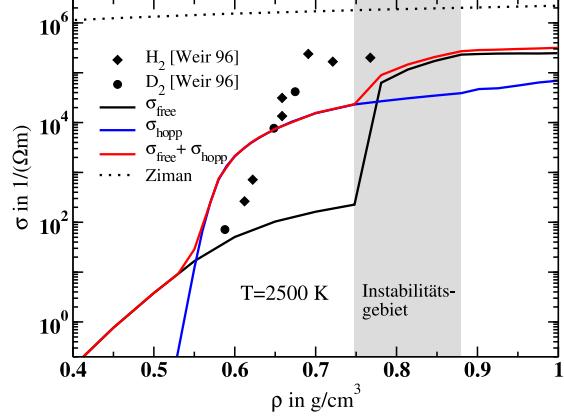


Abbildung 7.6: Einfluss des Hopping-Prozesses auf die elektrische Leitfähigkeit aus [Kuhlbrodt und Redmer \(2003\)](#).

Hierzu wurde von [Redmer u. a. \(2001\)](#) der Hoppingprozess untersucht. Mit zunehmender Dichte wird die Energiedifferenz der elektronischen Bänder benachbarter Atome kleiner. Zur Leitfähigkeit trägt die mit zunehmender Dichte steigende Wahrscheinlichkeit eines Elektrons bei, zu einem benachbarten Band überzuspringen. Dies wird hopping genannt. Bei der Berechnung werden nur die Hubbardenergiebänder berücksichtigt. Also die Energiebänder nahe der Fermikante. Die Berechnung der Hubbardbänder von [Röpke u. a. \(2003\)](#) zeigen, wie die getrennten Energiebänder zweier benachbarter Atome bei einer Grenzdichte verschmelzen. An dieser Grenzdichte steigt die Leitfähigkeit sprunghaft an. Abbildung 7.3 zeigt für 2500 K eine gute Übereinstimmung der Leitfähigkeit mit den Experimenten von [Weir u. a. \(1996\)](#).

7.4 Anwendung des Modells auf andere Fluide

Hier in dieser Arbeit wurde das Modell für Wasserstoff und Deuterium entwickelt. In der Fluid Variational Theory können auch effektive Paarpotentiale anderer Fluide vorgegeben werden. So berechneten [Juranek u. a. \(2003\)](#); [Redmer u. a. \(2003\)](#); [Schwarz u. a. \(2004\)](#) mit diesem Modellansatz die Zustandsgleichung von Helium und einer Mischung aus Heliumatomen und Wasserstoffmolekülen. Abbildung 7.7 zeigt die Berechnung der Heliumhugoniotkurve. Dabei wurden zwei unterschiedliche Ausgangszustände A und B angenommen. Die Ausgangswerte A wurden aus einer Rechnung von [Ross u. a. \(1983\)](#) entnommen und die Werte B direkt aus der verwendeten Zustandsgleichung. Im Ergebnis zu hohen Drücken gibt es offensichtlich keine bemerkenswerten Unterschiede. Darüber hinaus wurde das Modell für Krypton, Xenon, Neon und Argon verwendet.

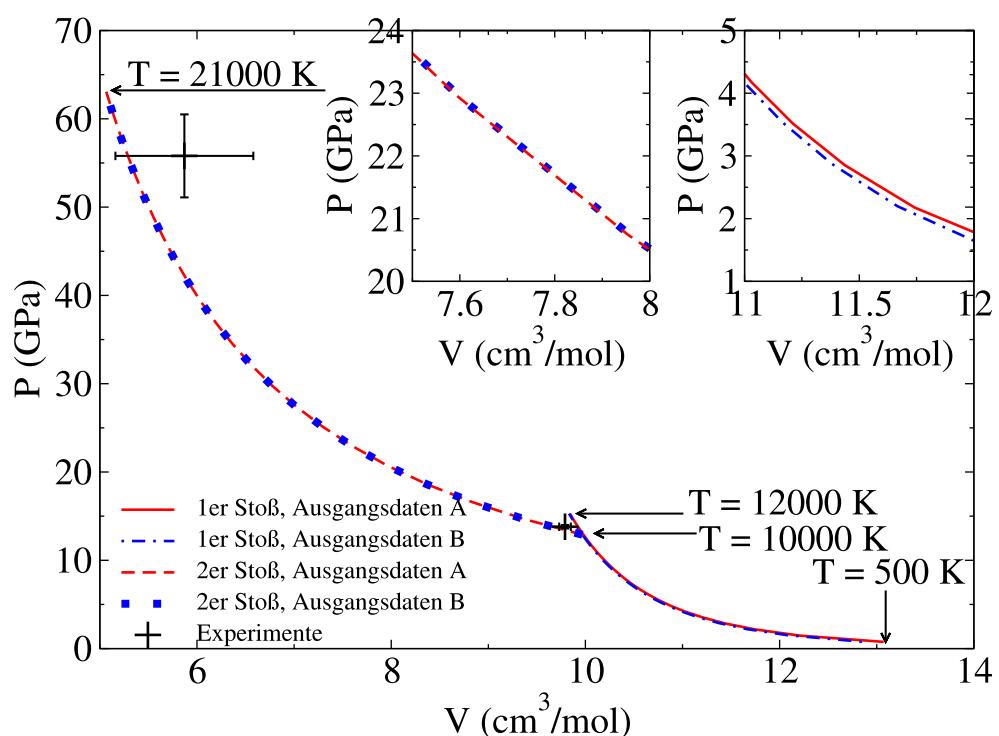


Abbildung 7.7: Vergleich der Hugoniot von Helium mit Experimenten aus [Schwarz \(2003\)](#).

Kapitel 8

Zugehöriges C++ Programm

Für die Berechnungen dieser Arbeit entwickelten wir ein C++ Programm. Dieses besteht aus Programmteilen, die in verschiedenen Programmdateien zusammengefasst wurden. In der Abbildung 8.1 sind der Inhalt der Dateien und deren Verknüpfungen dargestellt.

Die meisten Dateien enthalten direkt die Funktionen, die in dieser Arbeit aufgeführt sind. Sie sind alle mit Klartextnamen benannt und lassen sich so leicht zuordnen. Eine Ausnahme bildet die Datei hardsphere.C. Hier wurde für den Wechselwirkungsterm in der FVT aufgrund der Numerik eine analytische Integration über dem Ortsraum vor der numerischen Integration über den Impulsraum durchgeführt. Deshalb ist dort das effektive Wechselwirkungspotential nicht mehr im Klartext zu finden, sondern nur die bereits über den Ortsraum integrierten Ausdrücke.

Sollen unabhängig vom Gesamtprogramm lediglich einzelne Funktionen ausgegeben werden, so muss bei den Korrelationsfunktionen in der Datei structurF.C die Klasse lee vorher initialisiert werden. Im Gesamtprogramm übernimmt diese Initialisierung die Minimierungsroutine der FVT. Wird diese umgangen, muss dieses berücksichtigt werden. Diese Struktur wurde gewählt, um in den verschiedenen Funktionen mehrfach benutzte Ausdrücke nur einmal berechnen zu müssen und so Rechenzeit zu sparen. In der Abbildung 8.1 wird deshalb extra darauf aufmerksam gemacht.

Werden im Hauptprogramm nur die FVT Ausgabeprozeduren genutzt, so werden zu einem Dichte und Temperatur Wertepaar die freie Energie innerhalb weniger Sekunden, in ungünstigen Fällen Minuten, minimiert. Aus dem Ergebnis werden ohne großen Zeitaufwand weitere thermodynamische Größen berechnet. Es sei denn, es sollen Relationen numerisch berechnet werden. Hier empfiehlt es sich eher, ein Datengitter mit der freien Energie oder gegebenenfalls auch einer anderen Größe wie der Entropie zu berechnen und daraus die Ableitungen. Andernfalls wird die Minimierungsroutine der FVT zwangsläufig sehr häufig aufgerufen. Dies führt zu Rechenzeiten von bis zu einer Stunde für einen Datenpunkt. Dies tritt z.B. bei der Berechnung einer Hugoniotkurve auf. Dort muss die Nullstellensuchroutine mit Hilfe der FVT etliche Datenpunkte berechnen, bevor sie eine akkurate Lösung gefunden hat.

Sollen Daten für ein Gemisch aus neutralem Wasserstoff und vollständig ionisiertem Wasserstoff berechnet werden, so wird die Partialdichte der freien Elektronen vorgegeben

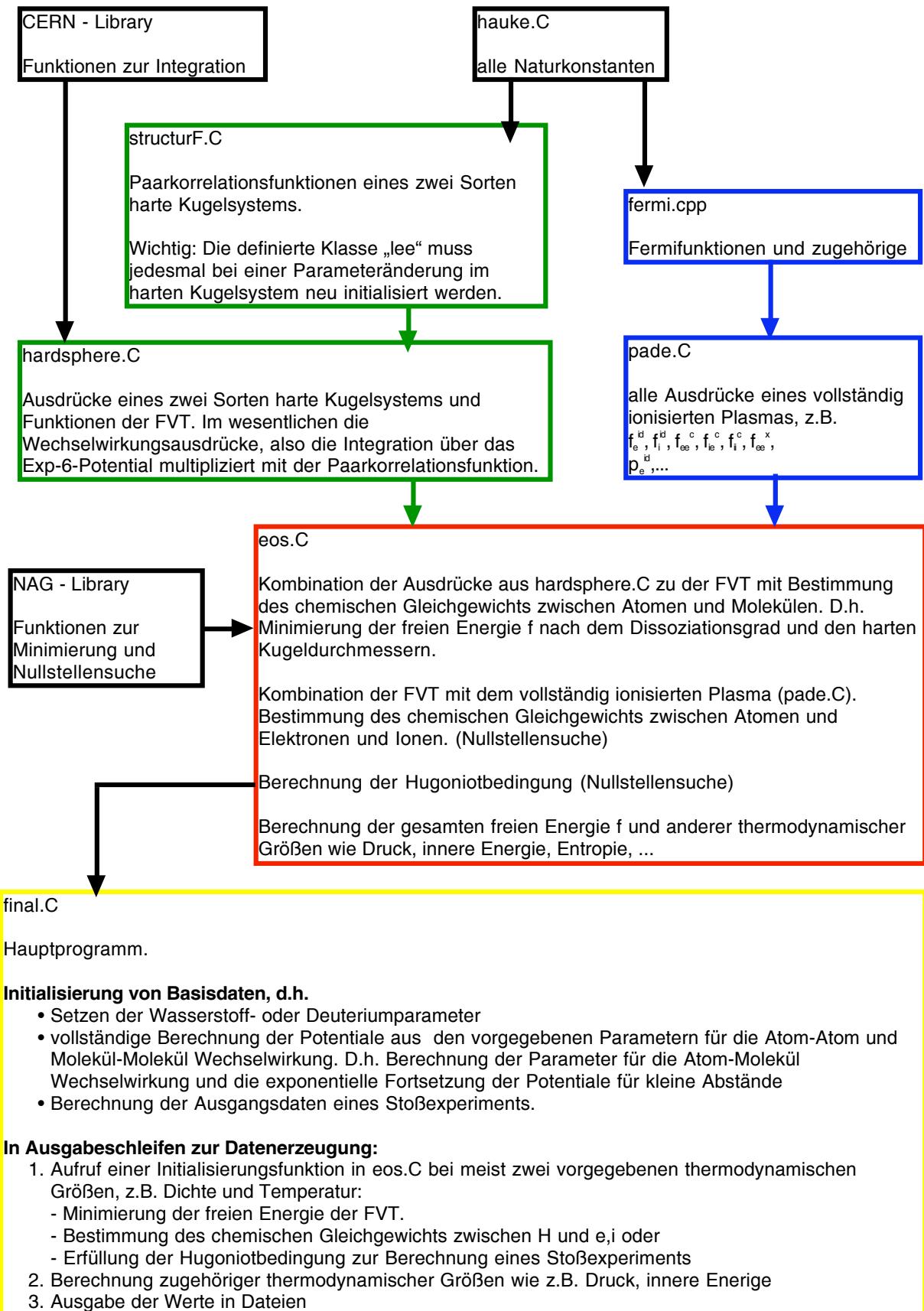


Abbildung 8.1: Diagramm zur Erläuterung der Programmmoduln

und über die Nullstellenroutine, die das chemische Potential zwischen Atomen und Elektronen und Ionen abgleicht, eine passende Partialdichte des neutralen Wasserstoffs gesucht. Deshalb wird hier die Minimierungsroutine der FVT häufig aufgerufen. Dies geschieht auf diese Weise, weil die Dichte der freien Ladungsträger in die FVT mit eingeht und sich auf die Minimierung auswirkt. Beide Partialdichten ergeben zusammen die Gesamtdichte. Die Gesamtdichte könnte vorgegeben werden; dieses würde jedoch zu einem unnötig zeitintensiven Iterationsverfahren führen. Deshalb ist es sinnvoll, sich eine dichte Folge aus Dichtewerten zu erzeugen und die gewünschten Datenpunkte durch Interpolation zwischen den berechneten zu gewinnen. Gleiches gilt hier auch für die Berechnung von Hugoniotkurven. Zum Auswerten der Daten wurde hierfür das Programm Mathematica benutzt.

Alle programmierten Funktionen wurden mit Ergebnissen anderer Autoren abgeglichen. Hierzu zählen die Padéformeln, die mit Stolzmann und Blöcker (2000) abgeglichen wurden, oder die FVT, die von Schwarz u. a. (2004) nachprogrammiert worden sind. Analytische Ableitungen wurden numerisch gegengeprüft. Fehler können so nahezu ausgeschlossen werden.

Die Programme stehen an der Universität Rostock im Institut für Physik in der Arbeitsgruppe *Statistische Physik* zur Verfügung. Ein Handbuch soll für sie erstellt werden.

Kapitel 9

Zusammenfassung & Ausblick

Ziel der Arbeit war die Beschreibung von Wasserstoff im chemischen Bild. Wasserstoff haben wir dazu als Mehrkomponentensystem aus einem neutralen Fluid - bestehend aus Atomen und Molekülen - und einem vollständig ionisierten Plasma - bestehend aus Elektronen und Protonen - beschrieben. Das neutrale Fluid wurde mit der Fluid Variational Theory (FVT) modelliert. Dabei wird die Wechselwirkung zwischen den Atomen und Molekülen über effektive Wechselwirkungspotentiale abgebildet. Im Bereich des neutralen Fluids stimmt die FVT mit den Stoßexperimenten überein. Im Bereich höherer Drücke als 1 Mbar macht sich die fehlende Ionisation bemerkbar. Dort reproduziert die FVT weder die Nova Laserdaten noch die Daten der Z-Maschine, sondern liegt dazwischen. Anhand der FVT allein kann nicht entschieden werden, welches der beiden Experimente aus Sicht des Modells als korrekt favorisiert werden müsste. Die FVT zeigt aufgrund der Druckdissoziation ähnlich wie die Nova Laserdaten eine starke Komprimierung um 1 Mbar über die beim idealen Gas maximale Kompression von 4 hinaus. Dies liefert den Hinweis, dass die Hinzunahme der Ionisation zu einer noch stärkeren Kompression führen müsste.

Hierzu verwendeten wir in einem ersten Schritt die Padénäherungen, um das vollständig ionisierte Plasma zu beschreiben. Mit den Padénäherungen wurden die Nova Laserexperimente oberhalb 1 Mbar bereits gut reproduziert. Damit verbunden war die Erwartung, die Kombination von FVT und Padénäherungen könnte eine Zustandsgleichung darstellen, die den gesamten Bereich der Stoßexperimente abdeckt.

Dazu wurde ein chemisches Gleichgewicht zwischen Atomen und den Elektronen und Protonen aufgestellt und gelöst. Der Abgleich wies auf einen Phasenübergang hin. Das Verhalten des chemischen Potentials und des Drucks waren zueinander nicht konsistent, so dass kein sinnvoller Übergang konstruiert werden konnte.

Daraufhin bot es sich an, die Beschreibung des vollständig ionisierten Plasmas auf die idealen Anteile zu reduzieren. Dies machte eine dichteabhängige Beschreibung der elektronischen Zustandssumme der Atome erforderlich. Entstanden ist ein Modell des partiell ionisierten Plasmas ohne Plasmaphasenübergang, das mit den Nova Laserdaten im gesamten Bereich gut übereinstimmt.

Diese Arbeit beschrieb Wasserstoff im chemischen Bild. Es bleibt eine offene Frage, ob es gelingt, Wasserstoff in diesem Bild präziser zu beschreiben, oder ob es prinzipiell nicht mög-

lich ist, weil der Übergangsbereich vom molekularem zu metallischem Wasserstoff sich nicht mit einzelnen chemischen Komponenten beschreiben lässt. Sobald Experimente vorliegen, die gleichzeitig Dichte, Temperatur, Druck und Leitfähigkeit bestimmen, wird deutlich, welche Modelle die Wirklichkeit am besten abbilden. Eine Klärung ist insofern dringend erforderlich, da sich das Interesse selten auf reine Materialien beschränkt, sondern wie beispielsweise in der Astrophysik Mischungen verschiedener Materialien beschrieben werden müssen, die das Problem ungleich komplexer werden lassen. Eine ungenaue Beschreibung der Einzelkomponenten trägt nicht zu einem guten Mischungsmodell bei. Dieses Modell wurde bereits bei [Schwarz u. a. \(2004\)](#) zur Beschreibung von Helium-Wasserstoff Gemischen benutzt, um damit die Dichteverteilung des Planeten Jupiter zu berechnen.

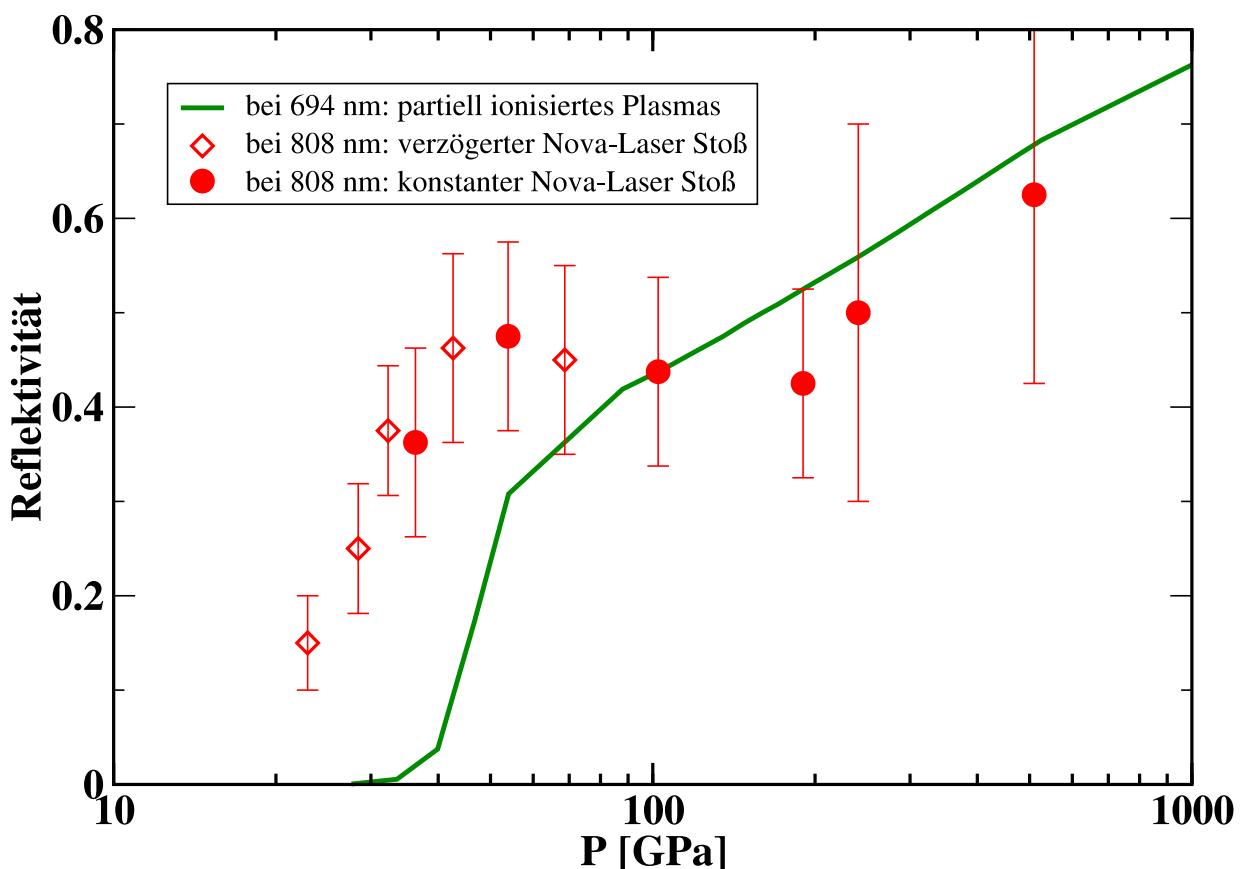


Abbildung 9.1: Reflektivitäten entlang der Hugoniotkurve. In rot die Messungen aus [Celliers u. a. \(2000\)](#) und in grün die Reflektivität entlang der Hugoniotkurve des partiell ionisierten Plasmas.

Erste Rechnungen der Reflektivität von [Holst \(2004\)](#) mit dem Modell von [Kuhlbrodt und Redmer \(2003\)](#), die die Zustandsdaten des partiell ionisierten Plasmas dieser Arbeit zugrundelegen, zeigen in Abbildung 9.1 bereits das Verhalten der Reflektivitätsmessungen bei den Nova Laserexperimenten von [Celliers u. a. \(2000\)](#). Hier werden Folgearbeiten anschließen müssen, um die Reflektivität und andere Zustandsgrößen wie zum Beispiel die

spezifischen Wärmekapazitäten mit anderen Experimenten zu vergleichen und aus anderen Zustandsgleichungen zu berechnen.

Außerdem steht ein Vergleich mit den Leitfähigkeitsmessungen von Nellis u. a. (1999) im Bereich niedriger Temperaturen um 3000 K im Rahmen des entwickelten Modells noch aus.

Anhang A

Konstanten

A.1 Konstanten und Standardfunktionen

Wir führen die in dieser Arbeit benutzten, aktuellsten Werte für physikalische Konstanten (2003) auf.

$$a_B = 5,291772083 \cdot 10^{-11} \text{ m} \quad \text{Bohr-Radius} \quad (\text{A.1})$$

$$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s} \quad \text{Lichtgeschwindigkeit} \quad (\text{A.2})$$

$$C_E = 0,577215664901532 \quad \text{Eulersche Konstante} \quad (\text{A.3})$$

$$\epsilon_0 = 1/(\mu_0 c^2) = 8,854187817 \cdot 10^{-12} \text{ F/m} \quad \text{elektrische Konstante} \quad (\text{A.4})$$

$$e = 2,7182818285 \quad (\text{A.5})$$

$$e = 1,602176462 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad \text{Elementarladung} \quad (\text{A.6})$$

$$\varepsilon = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}} \text{ reduzierte Elementarladung} \quad (\text{A.7})$$

$$h = 6,62606876 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad \text{Plancksches Wirkungsquantum} \quad (\text{A.8})$$

$$\hbar = 1,054571596 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \quad \text{Planck Konstante} \quad (\text{A.9})$$

$$k_B = 1,3806503 \cdot 10^{-23} \text{ J/K} \quad \text{Boltzmann-Konstante} \quad (\text{A.10})$$

$$m_e = 9,10938188 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \quad \text{Elektronmasse} \quad (\text{A.11})$$

$$m_p = 1,67262158 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad \text{Protonmasse} \quad (\text{A.12})$$

$$m_n = 1,66054021 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \quad \text{Neutronmasse} \quad (\text{A.13})$$

$$N_A = 6,02214199 \cdot 10^{23} \text{ Teilchen/mol} \quad \text{Avogadro-Konstante} \quad (\text{A.14})$$

$$R_\infty = 2,17987190 \cdot 10^{24} \text{ J} \quad \text{Rydberg} \quad (\text{A.15})$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} N A^{-2} \text{ magnetische Konstante} \quad (\text{A.16})$$

$$\Gamma[z] = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt \quad \text{Eulersche Gammafunktion; } \Gamma[z] \neq \Gamma = \Gamma[n, T] \quad (\text{A.17})$$

$$\zeta[s] = \sum_{k=1}^{\infty} k^{-s} \quad \text{Riemannsche Zetafunktion} \quad (\text{A.18})$$

A.2 Konstanten speziell für Wasserstoff

Ein Teil der Konstanten ist spezifisch für Wasserstoff. Sie können ersetzt werden durch die Konstanten für Deuterium. Das Modell kann auf diese Weise für beide Materialien verwendet werden.

$$m_p \quad \text{Wasserstoffionmasse} \quad (\text{A.19})$$

$$m_H = m_p \quad \text{Atommasse} \quad (\text{A.20})$$

$$m_{H_2} = 2m_H \quad \text{Molekülmasse} \quad (\text{A.21})$$

$$M_H = m_H N_A = 1,00727647 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol} \quad \text{molare Masse eines Atoms} \quad (\text{A.22})$$

$$h\nu = 6340 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Vibrationskonstante} \quad (\text{A.23})$$

$$a_0 = 0,0143 \text{ Terme höherer Ordnung der Vibration} \quad (\text{A.24})$$

$$x = 0,02736 \text{ Terme höherer Ordnung der Vibration} \quad (\text{A.25})$$

$$T\sigma_{H_2} = 87,58 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Rotationskonstante} \quad (\text{A.26})$$

$$D_0 = 51960,07 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Dissoziationsenergie} \quad (\text{A.27})$$

$$I_0 = 152018,3 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Ionisierungsenergie} \quad (\text{A.28})$$

A.3 Konstanten speziell für Deuterium

Ersetzen wir die folgenden Konstanten für Wasserstoff durch die hier aufgelisteten Werte für Deuterium, kann das Modell zur Berechnung eines Deuteriumfluids verwendet werden.

$$m_p \rightarrow m_p + m_n \quad \text{Deuteronmasse} \quad (\text{A.29})$$

$$m_H \rightarrow m_D = m_p + m_n \quad \text{Atommasse} \quad (\text{A.30})$$

$$m_{H_2} \rightarrow m_{D_2} = 2m_D \quad \text{Molekülmasse} \quad (\text{A.31})$$

$$M_H \rightarrow M_D = m_D N_A = 2,00782594 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol} \quad \text{molare Masse eines Atoms} \quad (\text{A.32})$$

$$h\nu = 4395 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Vibrationskonstante} \quad (\text{A.33})$$

$$a_0 = 0,0143 \text{ Terme höherer Ordnung der Vibration} \quad (\text{A.34})$$

$$x = 0,02736 \text{ Terme höherer Ordnung der Vibration} \quad (\text{A.35})$$

$$T\sigma_{H_2} \rightarrow T\sigma_{D_2} = 43,78 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Rotationskonstante} \quad (\text{A.36})$$

$$D_0 = 52866,38 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Dissoziationsenergie} \quad (\text{A.37})$$

$$I_0 = 157797,32 \text{ } k_B \text{K} \quad \text{Ionisierungsenergie} \quad (\text{A.38})$$

Anhang B

Funktionen

B.1 Paarkorrelationsfunktion für zwei Komponenten

Wir schreiben hier die Paarkorrelationsfunktion aus (Shimoji, 1977) speziell für Wasserstoff auf. Die Parameter k und l stehen sowohl für ein Atom A als auch ein Molekül A_2 . Dabei ist der Parameter l jedoch immer die andere Teilchensorte. Wenn also $k = A$ dann ist $l = A_2$ und umgekehrt.

$$g_{kk} = \int_0^\infty S_{kk}[q] \sin[qr] dr \quad (\text{B.1})$$

$$g_{kl} = \int_0^\infty S_{kl}[q] \sin[qr] dr \quad (\text{B.2})$$

$$S_{kk}[q, \eta] = \frac{1 - n_k c_{kk}[q]}{D_d[q]}, \quad (\text{B.3})$$

$$S_{kl}[q, \eta] = \frac{\sqrt{n_A n_{A_2}} c_{kl}[q]}{D_d[q]}, \quad (\text{B.4})$$

$$D_d[q] = (1 - n_A c_{AA}[q])(1 - n_{A_2} c_{A_2 A_2}[q]) - n_A n_{A_2} c_{AA_2}^2 \quad (\text{B.5})$$

$$c_{kl} = -\frac{4\pi}{q^3}(A \sin[q\sigma_{kl}] + B \cos[q\sigma_{kl}] + C \sin[q\lambda_{kl}] + D \cos[q\lambda_{kl}]) \quad (\text{B.6})$$

$$c_{kk} = -\frac{4\pi}{q^3}(A_k \sin[q\sigma_{kk}] + B_k \cos[q\sigma_{kk}] + C_k) \quad (\text{B.7})$$

$$A_k = a_k + 2b_k \sigma_{kk} + 4d\sigma_{kk}^3 - 24d\sigma_{kk}/q^2 \quad (\text{B.8})$$

$$B_k = (2b_k + 12d\sigma_{kk}^2)/2 - 24d/q^3 - \sigma_{kk}(a_k + \sigma_{kk}b_k + \sigma_{kk}^3 d)q \quad (\text{B.9})$$

$$A = a_A + 2b\sigma_{AA} + 4d\sigma_{AA}^2(\sigma_{AA_2} + 2\lambda_{AA_2}) - 24d\sigma_{AA_2}/q^2 \quad (\text{B.10})$$

$$B = (2b + 12d\sigma_{AA}\sigma_{AA})/q - 24d/q^3 \quad (\text{B.11})$$

$$-(\sigma_{kl}a_A + \sigma_{AA}^2 b + \sigma_{AA}^3 d(\sigma_{kl} + 3\lambda_{kl}))q \quad (\text{B.12})$$

$$C_k = 24d/q^3 - 2b_k/q \quad (\text{B.13})$$

$$C = 24\lambda_{AA_2}d/q^2 \quad (B.14)$$

$$D = (24d - 2bq^2)/q^3 \quad (B.15)$$

$$g_{kk}[\sigma_{kk}] = (1 + \eta/2 + 3/2\eta_l/\sigma_{ll}(\sigma_{kk} - \sigma_{ll}))(1 - \eta)^2 \quad (B.16)$$

$$g_{kl}[\sigma_{kl}] = (\sigma_{A_2A_2}g_{AA} + \sigma_{AA}g_{A_2A_2})/(2\sigma_{kl}) \quad (B.17)$$

$$d = (\eta_{AA}a_A/\sigma_{AA}^3 + \eta_{A_2}a_{A_2}/\sigma_{A_2A_2})/2 \quad (B.18)$$

$$b = -6(\eta_{A_2}g_{A_2A_2}[\sigma_{A_2A_2}]/\sigma_{A_2A_2}^2 + \eta_{AGAA}[\sigma_{AA}]/\sigma_{AA}^2)\sigma_{kl}g_{kl}[\sigma_{kl}] \quad (B.19)$$

$$b_k = -6(\eta_k g_{kk}[\sigma_{kk}]^2/\sigma_{kk} + \eta_l g_{kl}[\sigma_{kl}]^2\sigma_{kl}/\sigma_{ll}^3) \quad (B.20)$$

$$a_k = \frac{1}{k_B T} \frac{\partial p^{(c)}}{\partial n_k} \quad (B.21)$$

$$p^{(c)} = nk_B T \frac{1 + \eta + \eta^2 - 3\eta(y_1 + y_2\eta)}{(1 - \eta)^3} \quad (B.22)$$

$$\eta = \eta_A + \eta_{A_2}, \quad (B.23)$$

$$y_1 = (\eta_A^* + \eta_{A_2}^* - \eta_{AA_2} - \eta_{A_2A})/\eta,$$

$$y_2 = [\eta_A\eta_{A_2} + \eta_{A_2A}(\eta_A - 2\eta_{A_2}) + \eta_{AA_2}(\eta_{A_2} - 2\eta_A)]/\eta^2,$$

$$\eta_{kl} = (\eta_k^*\eta_l^*)^{1/3} \quad (B.24)$$

$$\eta_k^* = n_l/n_0\eta_k \quad (B.25)$$

$$(B.26)$$

B.2 Plasmaparameter

Zur Beschreibung des Verhältnisses aus Potentieller Energie und kinetischer Energie wird ein dimensionsloser Wechselwirkungsparameter Γ eingeführt. Er beschreibt die Stärke der Coulombwechselwirkung zur Bewegung der Teilchen.

$$\Gamma = \Gamma_e = \Gamma_i = \Gamma[n, T] \quad \text{Coulomb-Kopplungs-Parameter} \quad (B.27)$$

$$\Gamma[n, T] = \frac{\varepsilon^2}{k_B T} \left(\frac{4\pi n_e}{3} \right)^{1/3} \quad (B.28)$$

Wie sehr Quantenzustände das System beeinflussen wird durch den Entartungsparameter θ wiedergegeben. Er ist das Verhältnis aus kinetischer Energie zur Fermi-Energie. Je größer θ desto eher kann das System klassisch beschrieben werden.

$$\theta[n, T] = \theta_e = \frac{4}{(3\sqrt{\pi}n)^{2/3} \Lambda_e[T]^2} \quad \text{Entartungsparameter} \quad (B.29)$$

$$\Lambda_e[T] = \sqrt{\frac{2\pi}{m_e k_B T}} \hbar \quad \text{thermische de Broglie Wellenlänge des Elektrons} \quad (B.30)$$

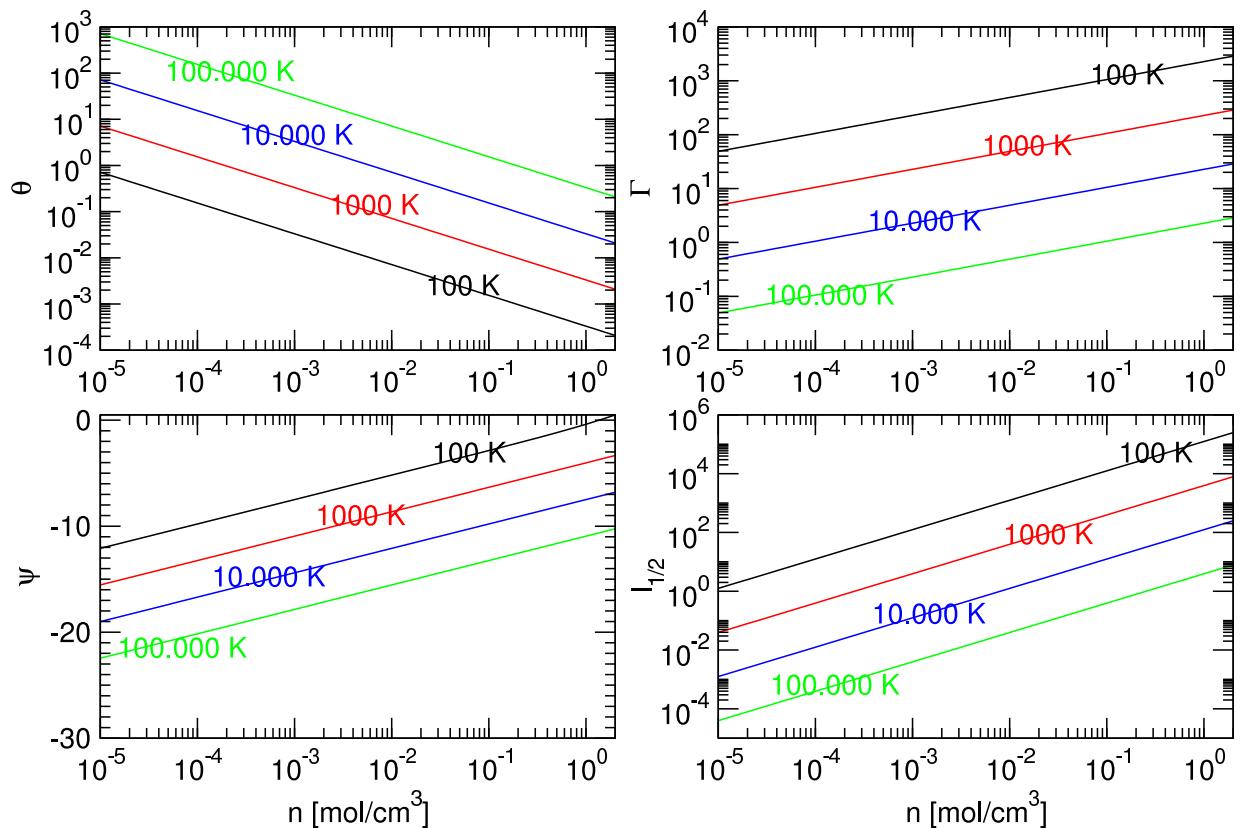


Abbildung B.1: Darstellung der Parameter Γ , θ , ψ und $I_{1/2}$ für vier verschiedene Temperaturen über der Teilchendichte.

B.3 Fermi-Dirac Integrale

Bei der Beschreibung des Elektronplasmas finden die Fermi-Dirac Integrale Verwendung. Die relativistischen Ausdrücke J_ν benötigen wir erst bei Temperaturen oberhalb des in dieser Arbeit untersuchten Bereiches. Wir beschränkten uns daher auf die einfachen Fermi-Dirac Integrale I_ν .

$$J_\nu = \frac{1}{\Gamma[\nu + 1]} \int_0^\infty \frac{z^\nu \sqrt{1 + \lambda z/2}}{e^{z-\psi} + 1} dz \text{ relativistisches Fermi-Dirac Integral} \quad (\text{B.31})$$

$$z = \frac{1}{\lambda} \left(\sqrt{1 + \left(\frac{p_e}{m_e c} \right)^2} - 1 \right) \quad \text{dimensionslose relativistische Energie} \quad (\text{B.32})$$

p_e Impuls der Elektronen

$$I_\nu = \frac{1}{\Gamma[\nu + 1]} \int_0^\infty \frac{z^\nu}{e^{z-\psi} + 1} dz \quad \text{Fermi-Dirac Integral} \quad (\text{B.33})$$

Für die Fermi-Dirac Integrale verwendeten wir Entwicklungen, die vom reduzierten chemischen Potential $\psi = g_e^{id}$ abhängen:

$$I_\nu[\psi] = \begin{cases} \sum_{n=0}^5 (-1)^n \frac{e^{(n+1)\psi}}{(n+1)^{\nu+1}} & \text{für } \psi < -5 \\ \text{Padénäherungen, siehe unten} & \text{für } -5 \leq \psi \leq 10 \\ \frac{\psi^{\nu+1}}{\Gamma[\nu+1]} \left(\frac{1}{\nu+1} + \sum_{n=1}^5 2 \binom{\nu}{2n-1} \frac{\Gamma[2n]\zeta[2n]}{\psi^{2n}} (1 - 2^{1-2n}) \right) & \text{für } 10 < \psi \end{cases} \quad (\text{B.34})$$

ψ wird über die Gleichung 5.1 berechnet. Für den Zwischenbereich für ψ von -5 bis 10 wurden Padénäherungen entwickelt. Es stehen die Entwicklungen von [Zimmermann u. a. \(1978\)](#) und [Stolzmann und Blöcker \(2000\)](#) zur Verfügung. Beide geben qualitativ gute Resultate. Wir führen beide Varianten auf:

B.3.1 Zimmermann-Formeln für Fermi-Dirac Integrale

$$I_{-1/2}[y] = \begin{cases} y/(1 + 0,3536y - 0,0099y^2 + 0,000375y^3) & \text{für } y < 5,5 \\ y^{1/3}/(0,806 + 0,4535y^{-4/3} + 1,7y^{-8/3}) & \text{für } y \geq 5,5 \end{cases} \quad (\text{B.35})$$

$$I_{1/2}[y] = y \quad (\text{B.36})$$

$$I_{3/2}[y] = \begin{cases} y + 0,1768y^2 - 0,0033y^3 + 0,000094y^4 & \text{für } y < 5,5 \\ 0,4836y^{5/3} + 1,3606y^{1/3} - 1,7y^{-1} & \text{für } y \geq 5,5 \end{cases} \quad (\text{B.37})$$

$$y = \frac{n_e \Lambda_e}{2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \theta^{-3/2} \quad (\text{B.38})$$

B.3.2 Stolzmann-Formeln für Fermi-Dirac Integrale

$$I_{-1/2}[\theta] = I_{1/2}[\theta] \frac{3}{2} \theta \frac{1 + 6,9572\theta^{5/4}}{(1 + 3,68\theta^{5/4})^{9/5}} \quad (\text{B.39})$$

$$I_{1/2}[\theta] = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \theta^{-3/2} \quad (\text{B.40})$$

$$I_{3/2}[\theta] = I_{1/2}[\theta] \frac{2}{5} \theta^{-1} \frac{(1 + 7,74\theta^{3/2})^{5/3}}{1 + 12,0987\theta^{3/2}} \quad (\text{B.41})$$

$$I_{5/2}[\theta] = I_{3/2}[\theta] \frac{2}{7} \theta^{-1} \frac{(1 + 9,50\theta^{7/4})^{11/7}}{1 + 9,82\theta^{7/4}} \quad (\text{B.42})$$

$$I_{7/2}[\theta] = I_{5/2}[\theta] \frac{2}{9} \theta^{-1} \frac{(1 + 13,50\theta^2)^{3/2}}{1 + 11,023\theta^2} \quad (\text{B.43})$$

$$I_{9/2}[\theta] = I_{7/2}[\theta] \frac{2}{11} \theta^{-1} \frac{(1 + 25,50\theta^{9/4})^{13/9}}{1 + 19,559\theta^{9/4}} \quad (\text{B.44})$$

$$\theta[n, T] = \left(\frac{8}{3\sqrt{\pi}n_e\Lambda_e^3} \right)^{2/3} \quad (\text{B.45})$$

Anhang C

Tabellen

C.1 Umrechnungstabellen

$$\begin{aligned}\rho_{H_2}[\text{g/cm}^3] &= n m_H \quad (n \text{ in gebundenen und freien Elektronen}) \\ &= n[\text{Elektronen}/\text{\AA}^3] 1,67262158 \cdot 10^6 \text{ g \AA}^3/\text{cm}^3\end{aligned}\tag{C.1}$$

$$\begin{aligned}\rho_{D_2}[\text{g/cm}^3] &= n m_D \\ &= n[\text{Elektronen}/\text{\AA}^3] 3,33316179 \cdot 10^6 \text{ g \AA}^3/\text{cm}^3 \\ &= 1,9927769855 \rho_{H_2}[\text{g/cm}^3]\end{aligned}\tag{C.2}$$

$$\begin{aligned}V[\text{cm}^3/\text{mol}] &= \frac{N_A}{n} \\ &= \frac{0,602214199 \text{ cm}^3/(\text{\AA}^3 \text{ mol})}{n[\text{Elektronen}/\text{\AA}^3]}\end{aligned}\tag{C.3}$$

$$\begin{aligned}r_s[a_B] &= \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \\ &= n[\text{Elektronen}/\text{\AA}^3]^{-1/3} 1,1722924462 [a_B(\text{Elektronen}/\text{\AA})^{1/3}]\end{aligned}\tag{C.4}$$

$$E[J] = k_B T = T[K] 1,380658 \cdot 10^{-23} [\text{J/K}]\tag{C.5}$$

$$= E[eV] 1,60217733 \cdot 10^{-19} [\text{J/(eV)}]\tag{C.6}$$

$$E[J/mol] = N_A k_B T = T[K] 8,3145112119 \text{ J/(K mol)}\tag{C.7}$$

$$E[J/kg] = k_B T / m_H = T[K] 8,2544552606 \cdot 10^3 \text{ J/(K kg)} \text{ für Wasserstoff}\tag{C.8}$$

$$E[J/kg] = k_B T / m_D = T[K] 4,1421871694 \cdot 10^3 \text{ J/(K kg)} \text{ für Deuterium}\tag{C.9}$$

$$E[eV] = \frac{k_B T}{eV} = T[K] 8,617386 \cdot 10^{-5} [\text{eV/K}]\tag{C.10}$$

$$= E[J] 6,2415063631 \cdot 10^{18} [\text{eV/J}]\tag{C.11}$$

ρ_{D_2} [g/cm ³]	ρ_{H_2} [g/cm ³]	n [mol/cm ³]	V [cm ³ /mol]	n [1/Å ³]	r _s [a _B]
2,00728e-4	1,00728e-4	1,00000e-4	1,00000e+4	6,02214e-5	2,99079e+1
2,00728e-3	1,00728e-3	1,00000e-3	1,00000e+3	6,02214e-4	1,38820e+1
2,00728e-2	1,00728e-2	1,00000e-2	1,00000e+2	6,02214e-3	6,44346e+0
2,00728e-1	1,00728e-1	1,00000e-1	1,00000e+1	6,02214e-2	2,99079e+0
5,01819e-1	2,51819e-1	2,50000e-1	4,00000e+0	1,50553e-1	2,20363e+0
5,04308e-1	2,53068e-1	2,51240e-1	3,98025e+0	1,51300e-1	2,20000e+0
6,71235e-1	3,36834e-1	3,34401e-1	2,99042e+0	2,01381e-1	2,00000e+0
8,34498e-1	4,18762e-1	4,15737e-1	2,40537e+0	2,50362e-1	1,86000e+0
1,00196e+0	5,02796e-1	4,99164e-1	2,00335e+0	3,00603e-1	1,75000e+0
1,00364e+0	5,03638e-1	5,00000e-1	2,00000e+0	3,01107e-1	1,74902e+0
1,34487e+0	6,74875e-1	6,70000e-1	1,49254e+0	4,03483e-1	1,58645e+0
1,50546e+0	7,55457e-1	7,50000e-1	1,33333e+0	4,51660e-1	1,52791e+0
1,71136e+0	8,58781e-1	8,52578e-1	1,17291e+0	5,13434e-1	1,46400e+0
2,00728e+0	1,00728e+0	1,00000e+0	1,00000e+0	6,02214e-1	1,38820e+0
2,98651e+0	1,49867e+0	1,48784e+0	6,72115e-1	8,95998e-1	1,21600e+0
5,36988e+0	2,69467e+0	2,67521e+0	3,73803e-1	1,61105e+0	1,00000e+0
2,00728e+1	1,00728e+1	1,00000e+1	1,00000e-1	6,02214e+0	6,44346e-1
7,79135e+1	3,90980e+1	3,88155e+1	2,57629e-2	2,33753e+1	4,10000e-1
2,00728e+2	1,00728e+2	1,00000e+2	1,00000e-2	6,02214e+1	2,99079e-1
2,00728e+3	1,00728e+3	1,00000e+3	1,00000e-3	6,02214e+2	1,38820e-1
2,19950e+4	1,10374e+4	1,09576e+4	9,12605e-5	6,59884e+3	6,25000e-2

Tabelle C.1: Ausgewählte Dichtewerte in verschiedenen Einheiten.

T [K]	E[eV]	E[J]	E[J/mol]
1,00000e0	8,61739e-5	1,38066e-23	8,31451e0
7,50000e+1	6,46304e-3	1,03549e-21	6,23588e+2
1,75000e+2	1,50804e-2	2,41615e-21	1,45504e+3
3,00000e+2	2,58522e-2	4,14197e-21	2,49435e+3
3,00000e+3	2,58522e-1	4,14197e-20	2,49435e+4
5,00000e+3	4,30869e-1	6,90329e-20	4,15726e+4
7,81300e+3	6,73276e-1	1,07871e-19	6,49613e+4
1,00000e+4	8,61738e-1	1,38066e-19	8,31451e+4
1,16044e+4	1,00000e0	1,60218e-19	9,64852e+4
1,50000e+4	1,29261e+0	2,07099e-19	1,24718e+5
1,56250e+4	1,34647e+0	2,15728e-19	1,29914e+5
1,60000e+4	1,37878e+0	2,20905e-19	1,33032e+5
1,25000e+5	1,07717e+1	1,72582e-18	1,03931e+6
1,00000e+6	8,61739e+1	1,38066e-17	8,31451e+6

Tabelle C.2: Ausgewählte Energiewerte in verschiedenen Einheiten.

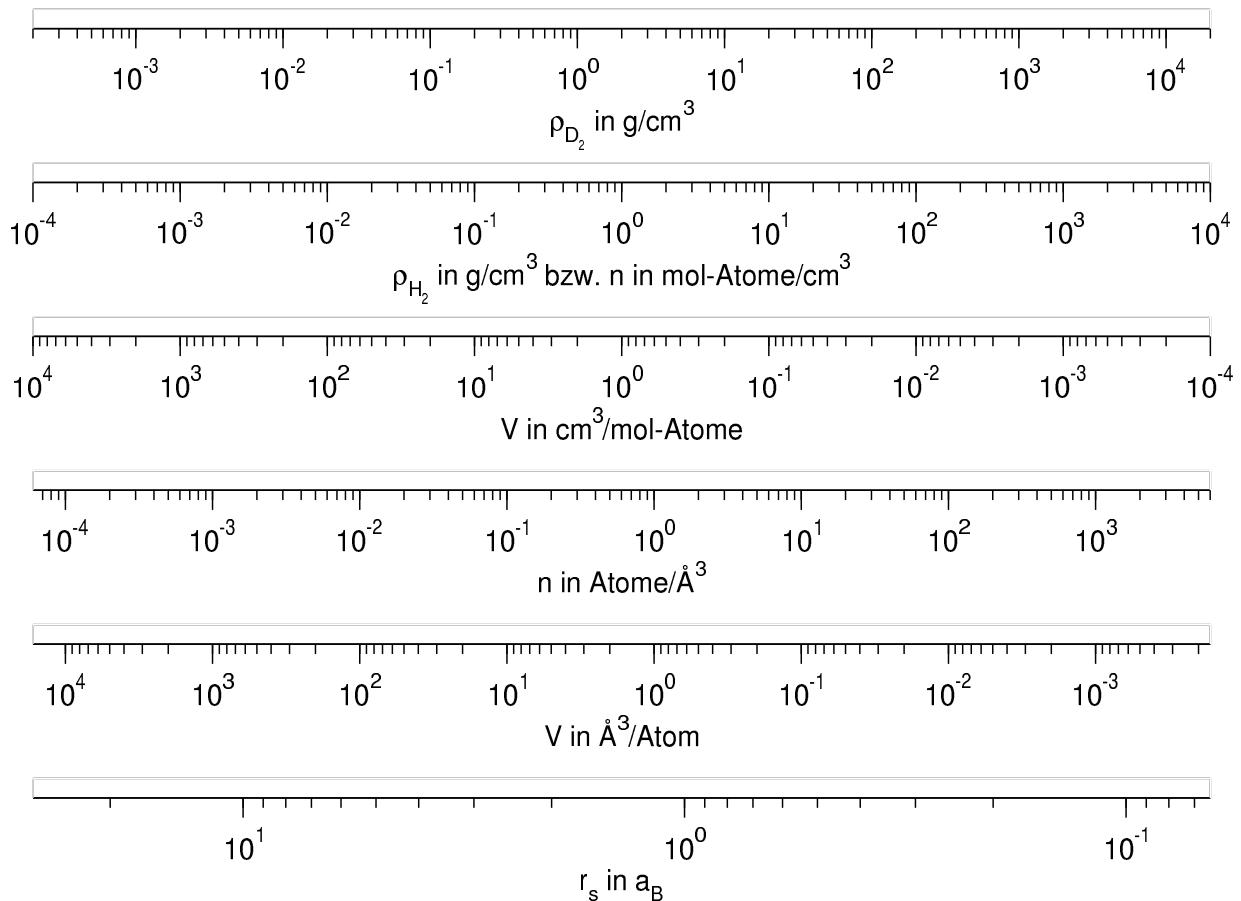


Abbildung C.1: Verschiedene Dichteskalen im Vergleich.

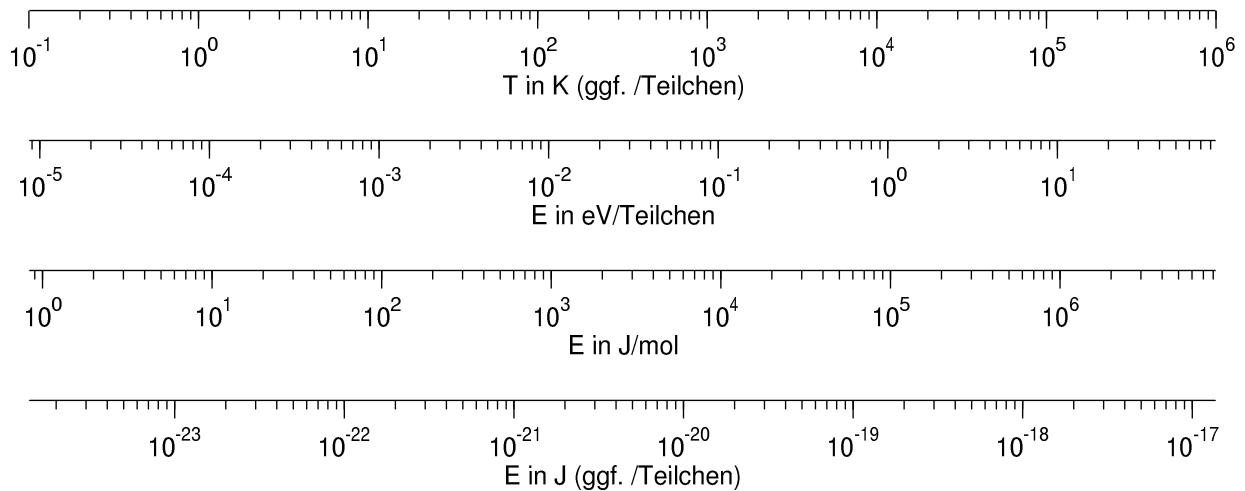


Abbildung C.2: Verschiedene Energieskalen im Vergleich.

Literaturverzeichnis

- [Aguilera 2004] AGUILERA, Deborah N.: Modelle für große Planeten. (2004)
- [Akella 1996] AKELLA, Jagannadham: The Diamond Anvil Cell: Probing the Behavior of Metals under Ultrahigh Pressures. In: *Science & Technology Review* (1996)
- [Aviram u. a. 1976a] AVIRAM, I. ; GOSHEN, S. ; ROSENFELD, Y. ; THIEBERGER, R.: Calculation of the pressure dissociation of H₂ by the van der Waals one-fluid theory. In: *J. Chem. Phys.* 64 (1976), S. 4741
- [Aviram u. a. 1976b] AVIRAM, I. ; GOSHEN, S. ; ROSENFELD, Y. ; THIEBERGER, R.: Comments on pressure dissociation of H₂. In: *J. Chem. Phys.* 65 (1976), S. 846
- [Barker und Henderson 1976] BARKER, J. A. ; HENDERSON, D. H.: What is liquid - understanding states of matter. In: *Rev. Mod. Phys.* 48 (1976), S. 587
- [Bates 2003] BATES, Jason W.: Reconstruction of Ross' linear-mixing model for the equation of state of deuterium. In: *Computer Physics Communications* 151 (2003), S. 149
- [Belov u. a. 2002] BELOV, S. I. ; BORISKOV, G. V. ; BYKOV, A. I. ; IL'KAEV, R. I. ; LUK'YANOV, N. B. ; MATVEEV, A. Y. ; MIKHAILOVA, O. L. ; SELEMIR, V. D. ; SIMAKOV, G. V. ; TRUNIN, R. F. ; TRUSOV, I. P. ; URLIN, V. D. ; FORTOV, V. E. ; SHUIKIN, A. N.: Shock Compression of Solid Deuterium. In: *JETP Lett.* 76 (2002), S. 433
- [Beule u. a. 1999a] BEULE, Dieter ; EBELING, Werner ; FÖRSTER, Andreas ; JURANEK, Hauke ; NAGEL, Stefan ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Equation of state for hydrogen below 10000 K: From the fluid to the plasma. In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), S. 14177–14181
- [Beule u. a. 1999b] BEULE, Dieter ; EBELING, Werner ; FÖRSTER, Andreas ; JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Hydrogen Equation of State and Plasma Phase Transition. In: *Contrib. Plasma Phys.* 39 (1999), S. 21–24
- [Beule u. a. 2000] BEULE, Dieter ; EBELING, Werner ; FÖRSTER, Andreas ; JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Compression of hydrogen and deuterium plasma. In: *J. Phys. IV France* 10 (2000), S. Pr5 – 295–299

- [Beule u. a. 2001] BEULE, Dieter ; EBELING, Werner ; FÖRSTER, Andreas ; JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Isentropes and Hugoniot curves for dense hydrogen and deuterium. In: *Phys. Rev. E* 63 (2001), S. 060202
- [Bezkrovniy u. a. 2005] BEZKROVNIY, V. ; FILINOV, V. S. ; KREMP, D. ; BONITZ, M. ; SCHLANGES, M. ; KRAEFT, W. D.: Monte Carlo results for the hydrogen Hugoniot. (2005)
- [Bezkrovniy u. a. 2004] BEZKROVNIY, V. ; SCHLANGES, M. ; KREMP, D. ; KRAEFT, W. D.: Reaction ensemble Monte Carlo technique and hypernetted chain approximation study of dense hydrogen. In: *Phys. Rev. E* 69 (2004), S. 061204
- [Bogolyubov 1970] BOGOLYUBOV, N. N.: On a minimax principle for some model problems of statistical physics. In: *Soviet journal of nuclear physics-USSR* 10 (1970), Nr. 2, S. 243
- [Brezinski 1991] BREZINSKI, Claude: *Springer series in computational mathematics*. Bd. 12: *History of continued fractions and Padé approximants*. Berlin : Springer, 1991
- [Brillouin 1932] BRILLOUIN, Léon: Statistique Quantique. In: *Exposés sur la théorie des quanta*. Paris : Léon Brillouin, 1932
- [Bunker u. a. 1997a] BUNKER, Alex ; NAGEL, Stefan ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Dissociation and thermodynamics of dense hydrogen fluid. In: *Contrib. Plasma Physics* 37 (1997), S. 115–128. – Erratum ibid. **37**, 469-470 (1997)
- [Bunker u. a. 1997b] BUNKER, Alex ; NAGEL, Stefan ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Dissociation and thermodynamics of dense hydrogen fluid. In: *Phys. Rev. B* 56 (1997), S. 3094–3098
- [Bunker u. a. 1998] BUNKER, Alex ; NAGEL, Stefan ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Equation of state and metal-nonmetal transition in dense hydrogen fluid. In: KALMAN, G. (Hrsg.) u. a.: *Strongly Coupled Coulomb Systems – Proceedings of the Int. Conf. in Boston 1997*. New York : Plenum Press, 1998, S. 365–368
- [Cauble u. a. 2000] CAUBLE, R. ; CELLIERS, P. M. ; COLLINS, G. W. ; DA SILVA, L. B. ; GOLD, D. M. ; FOORD, M. E. ; BUDIL, K. S. ; WALLACE, R. J. ; NG, A.: Equation of State and Material Property Measurements of Hydrogen Isotopes at the High-Pressure, High-Temperature, Insulator-Metal Transition. In: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 127 (2000), S. 267
- [Cauble u. a. 1997] CAUBLE, R. ; DA SILVA, L. B. ; PERRY, T. S. ; BACH, D. R. ; BUDIL, K. S. ; CELLIERS, P. ; COLLINS, G. W. ; NG, A. ; BARBEE JR., T. W. ; HAMMEL, B. A. ; HOLMES, N. C. ; KILKENNY, J. D. ; WALLACE, R. J. ; CHIU, G. ; WOOLSEY, N. C.: Absolute Measurements of the equation of state of low-Z materials in the multi-Mbar regime using laser-driven shocks. In: *Phys. Plasmas* 4 (1997), S. 1857–1861

- [Cauble 1999] CAUBLE, Robert C.: Putting More Pressure on Hydrogen. In: *Science & Technology Review* (1999), March, S. 13–19
- [Celliers u. a. 2000] CELLIERS, P. M. ; COLLINS, G. W. ; DA SILVA, L. B. ; GOLD, D. M. ; CAUBLE, R. ; WALLACE, R. J. ; FOORD, M. E. ; HAMMEL, B. A.: Shock-Induced Transformation of Liquid Deuterium into a Metallic Fluid. In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), S. 5564
- [Ceperley 1995] CEPERLEY, D. M.: Path integrals in the theory of condensed helium. In: *Rev. Mod. Phys.* 67 (1995), S. 279
- [Chabrier u. a. 1992] CHABRIER, Gilles ; SAUMON, Didier ; HUBBARD, William B. ; LUNINE, Jonathan I.: The molecular-metallic transition of hydrogen and the structure of Jupiter and Saturn. In: *The astrophysical journal* 391 (1992), S. 817
- [Chacham u. a. 1992] CHACHAM, Hélio ; ZHU, Xuejun ; LOUIE, Steven G.: Pressure-induced insulator-metal transitions in solid xenon and hydrogen: A first-principles quasiparticle study. In: *Phys. Rev. B* 46 (1992), S. 6688
- [Clark u. a. 1995] CLARK, S. J. ; ACKLAND, G. J. ; CRAIN, J.: Theoretical stability limit of diamond at ultrahigh pressure. In: *Phys. Rev. B* 52 (1995), S. 15035
- [Clément und Dufrêche 2001] CLÉROUIN, J. ; DUFRÊCHE, J.-F.: *Ab initio study of deuterium in the dissociating regime: Sound speed and transport properties.* In: *Phys. Rev. E* 64 (2001), S. 066406
- [Collins u. a. 1998] COLLINS, G. W. ; CELLIERS, P. ; DA SILVA, L. B. ; CAUBLE, R. ; GOLD, D. ; FOORD, M. ; BUDIL, K.S. ; STEWART, R. ; HOLMES, N. C. ; ROSS, M. ; HAMMEL, B. A. ; KILKENNY, J. D. ; WALLACE, R. J. ; NG, A.: *Equation of state measurements of hydrogen isotopes on Nova.* In: *Physics of Plasmas* 5 (1998), S. 1864–1869
- [Collins u. a. 1995] COLLINS, L. ; KWON, I. ; KRESS, J. ; TROULLIER, N. ; LYNCH, D.: *Quantum molecular dynamics simulations of hot, dense hydrogen.* In: *Phys. Rev. E* 52 (1995), S. 6202
- [Collins u. a. 2001] COLLINS, L. A. ; BICKHAM, S. R. ; KRESS, J. D. ; MAZEVET, S. ; LENOSKY, T. J. ; TROULLIER, N. J. ; WINDL, W.: *Dynamical and optical properties of warm dense hydrogen.* In: *Phys. Rev. B* 63 (2001), S. 184110
- [Da Silva u. a. 1997] DA SILVA, L. B. ; CELLIERS, P. ; COLLINS, G. W. ; BUDIL, K. S. ; HOLMES, N. C. ; BARBEE JR., T. W. ; HAMMEL, B. A. ; KILKENNY, J. D. ; WALLACE, R. J. ; ROSS, Marvin ; CAUBLE, R. ; NG, A. ; CHIU, G.: *Absolute Equation of State Measurements on Shocked Liquid Deuterium up to 200 GPa (2 Mbar).* In: *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997), S. 483

- [Debye und Hückel 1923] DEBYE, P. ; HÜCKEL, E.: Zur Theorie der Elektrolyte. In: Phys. Z. 24 (1923), Nr. 9, S. 185
- [Deserno 2003] DESERNO, Markus: The Henderson Theorem. 2003
- [Deserno 2004] DESERNO, Markus: Rayleigh-Ritz and Gibbs-Bogoliubov. 2004. – URL <http://www.mpi-p-mainz.mpg.de/~deserno/science.html>
- [Desjarlais 2003] DESJARLAIS, Michael P.: Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing. In: Phys. Rev. B 68 (2003), S. 064204
- [Dick und Kerley 1980] DICK, R. D. ; KERLEY, G. I.: Shock compression data for liquids. II. Condensed hydrogen and deuterium. In: J. Chem. Phys. 73 (1980), S. 5264
- [Ebeling 1985] EBELING, Werner: Statistical thermodynamics of fluid hydrogen at high energy density. In: Physica A 130 (1985), S. 587
- [Ebeling u. a. 1988] EBELING, Werner ; FÖRSTER, Andreas ; RICHERT, W.: Thermodynamic properties and plasma phase transition of xenon at high pressure and high temperature. In: Physica A 150 (1988), S. 159–171
- [Ebeling und Richert 1982] EBELING, Werner ; RICHERT, W.: Thermodynamic Functions of Nonideal Hydrogen Plasmas. In: Annalen der Physik 39 (1982), S. 362–370
- [Ebeling und Richert 1985] EBELING, Werner ; RICHERT, W.: Pressure Ionization of Atoms in Plasmas. In: Contrib. Plasma Phys. 25 (1985), S. 431–436
- [Ebeling u. a. 1999] EBELING, Werner ; STOZMANN, Werner ; FÖRSTER, A. ; KASCH, M.: Quasiclassical Statistical Thermodynamics and New Padé Approximations for the Free Charges in Strongly-Coupled Plasma. In: Contrib. Plasma Phys. 39 (1999), S. 287–306
- [Filinov u. a. 2001a] FILINOV, V. S. ; BONITZ, M. ; EBELING, W. ; FORTOV, V. E.: Thermodynamics of hot dense H-plasmas: path integral Monte Carlo simulations and analytical approximations. In: Plasma Physics and Controlled Fusion 43 (2001), S. 743
- [Filinov u. a. 2001b] FILINOV, V. S. ; BONITZ, M. ; KREMP, D. ; KRAEFT, W. D. ; EBELING, W. ; LEVASHOV, P. R. ; FORTOV, V. E.: Path integral simulations of the thermodynamic properties of quantum dense plasma. In: Contrib. Plasma Phys. 41 (2001), S. 135
- [Filinov u. a. 2003] FILINOV, V. S. ; BONITZ, Michael ; LEVASHOV, P. ; FORTOV, V. E. ; EBELING, Werner ; SCHLANGES, Manfred ; KOCH, S. W.: Plasma phase transition in dense hydrogen and electron-hole plasmas. In: J. Phys. A 36 (2003), S. 6069

- [Filinov 2001] FILINOV, Vladimir: *Cluster expansion for ideal Fermi systems in the 'fixed-node approximation'*. In: J. Phys. A 34 (2001), S. 1665
- [Filinov u. a. 2001c] FILINOV, V.S. ; FORTOV, V.E. ; BONITZ, M. ; LEVASHOV, P.R.: *Phase transitions in strongly degenerate hydrogen plasma*. In: JETP Lett. 74 (2001), S. 384
- [Fitzer u. a. 2003] FITZER, N. ; KULIGK, A. ; REDMER, R. ; STÄDELE, M. ; GOODNICK, S. M. ; SCHATTKE, W.: *Full band Monte Carlo simulations of high-field electron transport in GaAs and ZnS*. In: Phys. Rev. B 67 (2003), S. 201201
- [Galli u. a. 2000] GALLI, Giulia ; HOOD, Randolph Q. ; HAZI, Andrew U. ; GYGI, François: *Ab initio simulations of compressed liquid deuterium*. In: Phys. Rev. B 61 (2000), S. 909–912
- [Gell-Mann und Brueckner 1957] GELL-MANN, Murray ; BRUECKNER, Keith A.: *Correlation Energy of an Electron Gas at High Density*. In: Phys. Rev. 106 (1957), S. 364
- [Gibbs 1902] GIBBS, J. W.: Elementary principles in statistical mechanics : developed with especial reference to the rational foundation of thermodynamics. Kap. Theorem III, S. 131. New York, 1902
- [Guillot 1999] GUILLOT, Tristan: *Interiors of Giant Planets Inside and Outside the Solar System*. In: Science 286 (1999), S. 72–77
- [Guillot u. a. 2004] GUILLOT, Tristan ; STEVENSON, David J. ; HUBBARD, William B. ; SAUMON, Didier: *Jupiter*. Kap. The Interior of Jupiter, 2004
- [Haronska u. a. 1987] HARONSKA, Peter ; KREMP, Dietrich ; SCHLANGES, Manfred: *Equation of State, Composition and Phase Transition in Hydrogen Pasmas*. In: Wissenschaftliche Zeitschrift der Wilhelm-Pieck-Universität Rostock 30 (1987), Nr. 1, S. 98–108
- [Hemley u. a. 1990] HEMLEY, R. J. ; MAO, H. K. ; FINGER, L. W. ; JEPHOAT, A. P. ; HAZEN, R. M. ; ZHA, C. S.: *Equation of state of solid hydrogen and deuterium from single-crystal x-ray diffraction to 26.5 GPa*. In: Phys. Rev. B 42 (1990), S. 6458
- [Henderson und Leonard 1971] HENDERSON, D. ; LEONARD, P. J.: *Liquid State*. In: Physical Chemistry - An Advanced Treatise. New York : Academic, 1971 (Vol. 8 B), S. 418
- [Henderson 1974] HENDERSON, R. L.: *A uniqueness theorem for fluid pair correlation functions*. In: Physics Letters 49A (1974), Nr. 3, S. 197–198
- [Hohenberg und Kohn 1964] HOHENBERG, P. ; KOHN, W.: *Inhomogeneous Electron Gas*. In: Phys. Rev. 136 (1964), S. B864–B871

- [Holmes u. a. 1995] HOLMES, N. C. ; ROSS, Marvin ; NELLIS, W. J.: Temperature measurements and dissociation of shock-compressed liquid deuterium and hydrogen. In: Phys. Rev. B 52 (1995), S. 15835–15845
- [Holmes 2001] HOLMES, Neil: Sound velocities and absurd optical properties of deuterium. Jan 2001. – URL <http://online.itp.ucsb.edu/online/hp01/holmes/pdf/Holmes.pdf>
- [Holmes 2000] HOLMES, Neil C.: Shocking Gas-Gun Experiments. In: Science & Technology Review (2000), Sep, S. 13–19
- [Holst 2004] HOLST, Bastian: Reflektivitäten bei den Stoßexperimenten des Nova Lasers. 2004. – private Mitteilung
- [Huber und Herzberg 1979] HUBER, K. P. ; HERZBERG, G.: Molecular Spectra and Molecular Structure. Vol. IV: Constants of Diatomic Molecules. New York : Van Nostrandt, 1979
- [Juranek 1998] JURANEK, Hauke: Berechnung der Zustandsgleichung für Wasserstoff im Mbar Bereich (Diplomarbeit). 1998
- [Juranek und Redmer 2000] JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald: Self-consistent fluid variational theory for pressure dissociation in dense hydrogen. In: J. Chem. Phys. 112 (2000), S. 3780–3786
- [Juranek u. a. 1999] JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd ; FORTOV, V. E. ; PYALLING, A.: A comparative study for the equation of state of dense fluid hydrogen. In: Contrib. Plasma Phys. 39 (1999), S. 251–260
- [Juranek u. a. 2002] JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; ROSENFELD, Yaakov: Fluid variational theory for pressure dissociation in dense hydrogen: multicomponent reference system and non-additivity effects. In: J. Chem. Phys. 117 (2002), S. 1768
- [Juranek u. a. 2001] JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald ; STOLZMANN, Werner: Equation of State for Dense Hydrogen. In: Contrib. Plasma Phys. 41 (2001), S. 131–134
- [Juranek u. a. 2003] JURANEK, Hauke ; SCHWARZ, Volker ; REDMER, Ronald: Equation of state for hydrogen in the chemical picture: Possible application in astrophysics. In: J. Phys. A 36 (2003), S. 6181
- [Kahlbaum und Förster 1992] KAHLBAUM, Torsten ; FÖRSTER, Andreas: Generalized thermodynamik functions for electrons in a mixture of hard spheres: Application to partially ionized nonideal plasmas. In: Fluid Phase Equilibria 76 (1992), S. 71–86
- [Kaxiras und Guo 1994] KAXIRAS, Efthimios ; GUO, Zhian: Orientational order in dense molecular hydrogen: A first-principles path-integral Monte Carlo calculation. In: Phys. Rev. B 49 (1994), S. 11822

- [Kemp und Meyer-ter Vehn 1998] KEMP, Andreas ; VEHN, Jürgen Meyer-ter: An equation of state code for hot dense matter, based on the QEOS description. In: Nucl. Instrum. Methods A 415 (1998), S. 674
- [Kerley 1971] KERLEY, G. I.: A New Model of Fluids / Los Alamos Scientific Laboratory. 1971 (LA-4760). – Forschungsbericht
- [Kerley 1972a] KERLEY, G. I.: Equation of State and Phase Diagram of Dense Hydrogen. In: Phys. Earth Planet. Interiors 6 (1972), S. 78–82
- [Kerley 1972b] KERLEY, G. I.: A Theoretical Equation of State for Deuterium / Los Alamos Scientific Laboratory. 1972 (LA-4776, UC-34). – Forschungsbericht. Available at National Technical Information Service, U. S. Department of Commerce, 6285 Port Royal Road, Springfield, Virginia 22151
- [Kerley 1980] KERLEY, Gerald I.: Perturbation theory and the thermodynamic properties of fluids I. General theory. In: J. Chem. Phys. 73 (1980), S. 469
- [Kerley 1983] KERLEY, Gerald I.: A Model for the Calculation of Thermodynamic Properties of a Fluid Using Hard-Sphere Perturbation Theory and the Zero-Kelvin Isotherm of the Solid. In: HAILE, J. M. (Hrsg.) ; MANSOORI, G. A. (Hrsg.): Molecular Based Studies of Fluids. Washington D.C. : American Chemical Soc., 1983, S. 107
- [Kerley 2003] KERLEY, Gerald I.: Equations of State for Hydrogen and Deuterium / Sandia National Laboratories. 2003 (SAND2003-3613). – Forschungsbericht
- [Kitamura u. a. 2000] KITAMURA, Hikaru ; TSUNEYUKI, Shinji ; OGITSU, Tadashi ; MIYAKE, Takashi: Quantum distribution of protons in solid molecular hydrogen at megabar pressures. In: nature 404 (2000), S. 259–262
- [Klakow 1994] KLAKOW, D.: Molekulardynamik von Wellenpaketen in Coulomb-Systemen, Friedrich-Alexander Universität Erlangen Nürnberg, Dissertation, 1994
- [Klakow u. a. 1994a] KLAKOW, D. ; TOEPFFER, C. ; REINHARD, P.-G.: Hydrogen under extreme conditions. In: Phys. Lett. A 192 (1994), S. 55
- [Klakow u. a. 1994b] KLAKOW, D. ; TOEPFFER, C. ; REINHARD, P.-G.: Semiclassical molecular dynamics for strongly coupled Coulomb systems. In: J. Chem. Phys. 101 (1994), S. 10 766
- [Knaup 2001] KNAUP, Michael: Die Methode der Wellenpakets-Molekulardynamik (WPMD) mit Anwendung auf Wasserstoff, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Dissertation, 2001
- [Knaup 2003] KNAUP, Michael: Wave packet molecular dynamics simulations of warm dense hydrogen. In: Journal of Physics A 36 (2003), S. 6165

- [Knaup u. a. 1999] KNAUP, Michael ; REINHARD, P.-G. ; TOEPFFER, Christian: *Wave Packet Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen Near the Transition to a Metallic Fluid.* In: *Contrib. Plasma Phys.* 39 (1999), S. 57–60
- [Knaup u. a. 2001] KNAUP, Michael ; REINHARD, P.-G. ; TOEPFFER, Christian: *Wave Packet Molecular Dynamics Simulations of Deuterium in the Region of Laser Shock-Wave Experiments.* In: *Contrib. Plasma Phys.* 41 (2001), S. 159
- [Knudson u. a. 2003] KNUDSON, M. D. ; HANSON, D. L. ; BAILEY, J. E. ; HALL, C. A. ; ASAY, J. R.: *Use of a Wave Reverberation Technique to Infer the Density Compression of Shocked Liquid Deuterium to 75 GPa.* In: *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), S. 035505
- [Knudson u. a. 2001] KNUDSON, M. D. ; HANSON, D. L. ; BAILEY, J. E. ; HALL, C. A. ; ASAY, J. R. ; ANDERSON, W. W.: *Equation of State Measurements in Liquid Deuterium to 70 GPa.* In: *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), S. 225501
- [Knudson u. a. 2004] KNUDSON, M. D. ; HANSON, D. L. ; BAILEY, J. E. ; HALL, C. A. ; ASAY, J. R. ; DEENEY, C.: *Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques.* In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), S. 144209
- [Konstanten 2003] KONSTANTEN: Fundamental Physical Constants. 2003. – URL <http://physics.nist.gov/constants>
- [Kuhlbrodt und Redmer 2003] KUHLBRODT, Sandra ; REDMER, Ronald: *Electrical conductivity in dense aluminum fluid.* In: *J. Phys. A* 36 (2003), S. 6027
- [Kwon u. a. 1996] KWON, I. ; COLLINS, L. ; KRESS, J. ; TROULLIER, N.: *Electrical conductivities for hot, dense hydrogen.* In: *Phys. Rev. E* 54 (1996), S. 2844
- [Kwon u. a. 1994] KWON, I. ; KRESS, J. D. ; COLLINS, L. A.: *Tight-binding models for hot dense hydrogen.* In: *Phys. Rev. B* 50 (1994), S. 9118–9123
- [Larkin 1960] LARKIN, A. I.: *Thermodynamic functions of a low temperature plasma.* In: Sov. Phys. JETP-USSR 11 (1960), S. 1363–1364
- [Lebowitz 1964] LEBOWITZ, J. L.: *Exact Solution of Generalized Percus-Yevick Equation for a Mixture of Hard Spheres.* In: *The Physical Review* 133 (1964), S. A895–A899
- [Lenosky u. a. 2000] LENOSKY, T. J. ; BICKHAM, S. R. ; KRESS, J. D. ; COLLINS, L. A.: *Density-functional calculation of the Hugoniot of shocked liquid deuterium.* In: *Phys. Rev. B* 61 (2000), S. 1–4
- [Lenosky u. a. 1997] LENOSKY, T. J. ; KRESS, J. D. ; COLLINS, L. A.: *Molecular-dynamics modeling of the Hugoniot of shocked liquid deuterium.* In: *Phys. Rev. B* 56 (1997), S. 5164

- [Lenosky u. a. 1999] LENOSKY, T. J. ; KRESS, J. D. ; COLLINS, L. A. ; REDMER, Ronald ; JURANEK, Hauke: *Simulations of fluid hydrogen: Comparison of a dissociation model with tight binding molecular dynamics.* In: Phys. Rev. E 60 (1999), S. 1665–1673
- [Loubeyre u. a. 2003] LOUBEYRE, P. ; CELLIERS, P. M. ; HICKS, D. G. ; HENRY, E. ; DEWAELE, A. ; PASLEY, J. ; EGGERT, J. ; KOENIG, M. ; OCCELLI, F. ; LEE, K. M. ; JEANLOZ, R. ; NEELY, D. ; BENUZZI-MOUNAIX, A. ; BRADLEY, D. ; BASTEA, M. ; MOON, Steve ; COLLINS, G. W.: Coupling static and dynamic compressions with a laser shock in a diamond anvil cell and the properties of dense fluid hydrogeny. 2003. – to be published
- [Magro u. a. 1996] MAGRO, W. R. ; CEPERLEY, D. M. ; PIERLEONI, C. ; BERNU, B.: *Molecular Dissociation in Hot, Dense Hydrogen.* In: Phys. Rev. Lett. 76 (1996), S. 1240
- [Mansoori und Canfield 1969] MANSOORI, G. A. ; CANFIELD, F. B.: *Variational Approach to the Equilibrium Thermodynamic Properties of Simple Liquids. I.* In: J. Chem. Phys. 51 (1969), S. 4958
- [Mansoori u. a. 1971] MANSOORI, G. A. ; CARNAHAN, N. F. ; STARLING, K. E. ; LELAND, T. W.: *Equilibrium Thermodynamic Properties of the Mixture of Hard Spheres.* In: J. Chem. Phys. 54 (1971), S. 1523
- [Mao und Hemley 1994] MAO, H. K. ; HEMLEY, R. J.: *Ultrahigh-pressure transitions in solid hydrogen.* In: Rev. Mod. Phys. 66 (1994), S. 671
- [Mayer und Goeppert-Mayer 1948] MAYER, J. E. ; GOEPPERT-MAYER, M.: Statistical Mechanics. Kap. 7, S. 149. New York : Wiley, 1948
- [Militzer und Ceperley 2000] MILITZER, B. ; CEPERLEY, D. M.: *Path Integral Monte Carlo Calculation of the Deuterium Hugoniot.* In: Phys. Rev. Lett. 85 (2000), S. 1890
- [Militzer u. a. 2002] MILITZER, B. ; CEPERLEY, D. M. ; KRESS, J. D. ; JOHNSON, J. D. ; COLLINS, L. A. ; MAZEVET, S.: *Calculation of a Deuterium Double Shock Hugoniot from Ab Initio Simulations.* In: Phys. Rev. Lett. 87 (2002), S. 275502
- [Militzer 2000] MILITZER, Burkhard: path integral Monte Carlo simulations of hot dense hydrogen. Urbana Campaign, Illinois, USA, Graduate College of the University of Illinois, Dissertation, 2000
- [Militzer und Ceperley 2001] MILITZER, Burkhard ; CEPERLEY, D. M.: *Path integral Monte Carlo simulation of the low-density hydrogen plasma.* In: Phys. Rev. E 63 (2001), S. 066404
- [Militzer und Pollock 2000] MILITZER, Burkhard ; POLLOCK, E. L.: *Variational density matrix method for warm, condensed matter: Application to dense hydrogen.* In: Phys. Rev. E 61 (2000), S. 3470–3482

- [Militzer und Pollock 2003] MILITZER, Burkhard ; POLLOCK, E. L.: *Lowering of the Kinetic Energy in Interacting Quantum Systems*. In: Phys. Rev. Lett. 89 (2003), S. 280401
- [Mostovych u. a. 2001a] MOSTOVYCH, A. N. ; CHAN, Y. ; LEHECHA, T. ; PHILLIPS, L. ; SCHMITT, A. ; SETHIAN, J. D.: *Reflected shock experiments on the equation-of-state properties of liquid deuterium at 100600 GPa (16 Mbar)*. In: Physics of Plasmas 8 (2001), Nr. 5, S. 2281–2286
- [Mostovych u. a. 2000] MOSTOVYCH, A. N. ; CHAN, Y. ; LEHECHA, T. ; SCHMITT, A. ; SETHIAN, J. D.: *Reflected Shock Experiments on the Equation-of-State Properties of Liquid Deuterium at 100600 GPa (16 Mbar)*. In: Phys. Rev. Lett. 85 (2000), S. 3873
- [Mostovych u. a. 2001b] MOSTOVYCH, A. N. ; CHANB, Y. ; SCHMITTA, A. ; SETHIANA, J. D.: *Compression of Deuterium to Extreme Pressures with Laser Driven Shock-Reflection Experiments*. In: Contrib. Plasma Phys. 41 (2001), S. 279–282
- [Nagao u. a. 2001] NAGAO, Kazutaka ; BONEV, S. A. ; ASHCROFT, N. W.: *Cusp-condition constraints and the thermodynamic properties of dense hot hydrogen*. In: Phys. Rev. B 64 (2001), S. 224111
- [Nagel u. a. 1998] NAGEL, Stefan ; REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd ; KNAUP, Michael ; TOEPFFER, Christian: *Proton-proton pair distribution in dense fluid hydrogen*. In: Phys. Rev. E 57 (1998), S. 5392–5397
- [Nellis u. a. 1981] NELLIS, W. J. ; VAN THIEL, M. ; MITCHELL, A. C. ; ROSS, M.: *The Equation of State of D_2 and Xe in the Megabar Pressure Range*. In: Proceedings of the Eighth Symposium on Thermophysical Properties. Gaithersburg, MD. : National Bureau of Standards, 1981
- [Nellis u. a. 1999] NELLIS, W. J. ; WEIR, S. T. ; MITCHELL, A. C.: *Minimum metallic conductivity of fluid hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar)*. In: Phys. Rev. B 59 (1999), S. 3434
- [Nellis 2002] NELLIS, William J.: Dynamic Compression of Hydrogen and Other Small Molecular Fluids at High Pressures. 2002. – Folien eines Vortrags, private Mitteilung
- [Perrine 2003] PERRINE, Larry (Hrsg.): Annual Report 2002/2003. Sandia National Laboratories, 2003
- [Perrine 2004] PERRINE, Larry (Hrsg.): Annual Report 2003/2004. Sandia National Laboratories, 2004
- [Pierleoni u. a. 1994] PIERLEONI, C. ; CEPERLEY, D. M. ; BERNU, B. ; MAGRO, W. R.: *Equation of State of the Hydrogen Plasma by Path Integral Monte Carlo Simulation*. In: Phys. Rev. Lett. 73 (1994), S. 2145

- [Planck 1925] PLANCK, Max: Zur Frage der Quantelung einatomiger Gase. Berlin : de Gruyter, 1925
- [Pratesi u. a. 1997] PRATESI, G. ; ULIVI, L. ; BAROCCHI, F. ; LOUBEYRE, P. ; LE TOULLEC, R.: Hyperacoustic velocity of fluid hydrogen at high pressure. In: Journal of Physics: Condensed Matter 9 (1997), S. 10059
- [Redmer u. a. 2003] REDMER, Ronald ; JURANEK, Hauke ; KUHLBRODT, Sandra ; SCHWARZ, Voker: In: Z. Phys. Chem. 217 (2003), 782 S
- [Redmer u. a. 2000] REDMER, Ronald ; KUHLBRODT, Sandra ; JURANEK, Hauke ; RÖPKE, Gerd: Electrical conductivity in dense fluids and plasmas. In: J. Phys. IV France 10 (2000), S. Pr5 – 319–322
- [Redmer und Röpke 1985] REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd: Quantum statistical approach to the equation of state and the critical point of cesium plasma. In: Physica A 130 (1985), S. 523–552
- [Redmer u. a. 2001] REDMER, Ronald ; RÖPKE, Gerd ; KUHLBRODT, Sandra ; REINHOLZ, Heidi: Hopping conductivity in dense hydrogen fluid. In: Phys. Rev. B 63 (2001), S. 233104
- [Ree 1988] REE, F. H.: Phase changes and chemistry at high pressures and temperatures. In: Shock Waves in Condensed Matter 1987. New York : Elsevier, 1988
- [Richert 1982] RICHERT, W.: Zur statistischen Thermodynamik von Vielteilchensystemen mit Coulombwechselwirkung, Humboldt Universität zu Berlin, Dissertation, 1982
- [Rogers 2000] ROGERS, Forrest J.: Ionization equilibrium and equation of state in strongly coupled plasmas. In: Physics of Plasmas 7 (2000), S. 51–58
- [Rosenfeld 1980a] ROSENFELD, Y.: Equation of State for Liquids from the Zero-Kelvin Isotherm: Quantum Corrections for Hydrogen. In: J. Chem. Phys. 73 (1980), S. 5760–5765
- [Rosenfeld 1980b] ROSENFELD, Y.: On Equation of State Calculations from Experimental Zero-Kelvin Isotherms. In: J. Chem. Phys. 73 (1980), S. 5753–5759
- [Ross 1998] ROSS, M.: Linear-mixing model for shock-compressed liquid deuterium. In: Phys. Rev. B 58 (1998), S. 669–677
- [Ross u. a. 2004] ROSS, M. ; COLLINS, G.W. ; CELLIERS, P.M. ; J.ROGERS, F.: Comment on „Shock compression of deuterium near 100 GPa pressure.“. 2004
- [Ross und Yang 2001] ROSS, M. ; YANG, Lin H.: Computer simulations for shock-compressed liquid deuterium: Failure of density-functional theory and molecular dynamics. In: Phys. Rev. B 64 (2001), S. 174102

- [Ross 1987] ROSS, Marvin: *Physics of dense fluids*. In: High Pressure Chemistry and Biochemistry. D. Reidel Publishing Company, 1987, S. 9–49
- [Ross und Radousky 1989] ROSS, Marvin ; RADOUSKY, H. B.: *Shock Wave Compression and Metallization of Simple Molecules*. In: POLIAN, A. (Hrsg.) ; LOUBEYRE, P. (Hrsg.) ; BOCCARA, N. (Hrsg.): Simple Molecular Systems at Very High Density. New York : Plenum, 1989, S. 47
- [Ross u. a. 1983] ROSS, Marvin ; REE, F. H. ; YOUNG, D. A.: *The equation of state of molecular hydrogen at very high density*. In: J. Chem. Phys. 79 (1983), S. 1487–1494
- [Röpke u. a. 2003] RÖPKE, Gerd ; REINHOLZ, Heidi ; NEISNER, Christian: *Correlations and spectral function in strongly coupled Coulomb systems*. In: Journal of Physics A: Math. Gen. 36 (2003), S. 5931–5939
- [Saumon und Chabrier 1989] SAUMON, D. ; CHABRIER, G.: *Fluid hydrogen at high density: The plasma phase transition*. In: Phys. Rev. Lett. 62 (1989), S. 2397
- [Saumon und Chabrier 1991] SAUMON, D. ; CHABRIER, G.: *Fluid hydrogen at high density: Pressure dissociation*. In: Phys. Rev. A 44 (1991), S. 5122
- [Saumon und Chabrier 1992] SAUMON, D. ; CHABRIER, G.: *Fluid hydrogen at high density: Pressure ionization*. In: Phys. Rev. A 46 (1992), S. 2084
- [Saumon u. a. 2000] SAUMON, D. ; CHABRIER, G. ; WAGNER, D. J. ; XIE, X.: *Modeling pressure-ionization of hydrogen in the context of astrophysics*. In: High Pressure Research 16 (2000), S. 331
- [Saumon u. a. 1989] SAUMON, D. ; CHABRIER, G. ; WEIS, J. J.: *Application of hard sphere perturbation theory to a high-temperature binary mixture*. In: J. Chem. Phys. 90 (1989), S. 7395
- [Saumon und Guillot 2004] SAUMON, Didier ; GUILLOT, Tristan: *Shock compression of deuterium and the interiors of Jupiter and Saturn*. In: Astrophysical Journal 609 (2004), S. 1170–1180
- [Schlanges und Kremp 1982] SCHLANGES, M. ; KREMP, D.: *The Equation of State for the Hydrogen Plasma on Account of Atom-Atom Interaction*. In: Annalen der Physik 39 (1982), S. 69
- [Schlanges u. a. 1995] SCHLANGES, Manfred ; BONITZ, Michael ; TSCHITSCHJAN, A.: *Plasma Phase Transition in Fluid Hydrogen-Helium Mixtures*. In: Contrib. Plasma Phys. 35 (1995), S. 109–125
- [Schwarz 2003] SCHWARZ, Volker: Thermodynamik von Wasserstoff-Helium-Gemischen und Modellierung von großen Planeten, Universität Rostock, Diplomarbeit, 2003

- [Schwarz u. a. 2004] SCHWARZ, Volker ; JURANEK, Hauke ; NETTELmann, Nadine ; REDMER, Ronald: *EOS of helium and hydrogen and its application to astrophysics*. In: GSI report (2004)
- [Shimoji 1977] SHIMOJI, M.: Liquid Metals. S. 64. London : Academic Press, 1977
- [Stolzmann 1996] STOLZMANN, Werner: Thermodynamics of Non-Ideal Plasmas, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Dissertation, 1996. – Habilitationsschrift
- [Stolzmann 2001] STOLZMANN, Werner: Phasendiagramm für Wasserstoff. 2001. – private Mitteilung
- [Stolzmann und Blöcker 1996a] STOLZMANN, Werner ; BLÖCKER, T.: *Equation of state for multicomponent plasmas by Padé approximants*. In: Physics Letters A 221 (1996), S. 99–103
- [Stolzmann und Blöcker 1996b] STOLZMANN, Werner ; BLÖCKER, T.: *Thermodynamical properties of stellar matter*. In: Astron. Astrophys. 314 (1996), S. 1024–1040
- [Stolzmann und Blöcker 2000] STOLZMANN, Werner ; BLÖCKER, T.: *Thermodynamical properties of stellar matter*. In: Astron. Astrophys. 361 (2000), S. 1152
- [Stolzmann und Blöcker 1999] STOLZMANN, Werner ; BLÖCKER, T.: *A Semirelativistic Equation of State for Stellar Interiors*. In: Contrib. Plasma Phys. 39 (1999), S. 105–108
- [Stolzmann und Ebeling 1998] STOLZMANN, Werner ; EBELING, Werner: *New Padé approximations for the free charges in two-component strongly coupled plasmas based on the Unsöld-Berlin-Montroll asymptotics*. In: Physics Letters A 248 (1998), S. 242–246
- [Tahir u. a. 2003a] TAHIR, N. A. ; JURANEK, H. ; SHUTOV, A. ; REDMER, R. ; PIRIZ, A. R. ; TEMPORAL, M. ; VARENTSOV, D. ; UDREA, S. ; HOFFMANN, D. H. H. ; DEUTSCH, C. ; LOMONOSOV, I. ; FORTOV, V. E.: *Influence of the equation of state on the compression and heating of hydrogen*. In: Phys. Rev. B 67 (2003), S. 184101
- [Tahir u. a. 2003b] TAHIR, N. A. ; PIRIZ, A. R. ; SHUTOV, A. ; VARENTSOV, D. ; UDREA, S. ; HOFFMANN, D. H. H. ; JURANEK, H. ; PORTUGUES, R. F. ; LOMONOSOV, I. ; FORTOV, V. E.: *Creation of strongly coupled plasmas using an intense heavy ion beam: Low-entropy compression of hydrogen and the problem of hydrogen metallization*. In: J. Phys. A 36 (2003), S. 6129
- [Tahir u. a. 2001a] TAHIR, Naeem A. ; HOFFMANN, D. H. H. ; KOZYREVA, A. ; TAUSCHWITZ, A. ; SHUTOV, A. ; MARUHN, J. A. ; SPILLER, P. ; NEUNER, U. ; JACOBY, J. ; ROTH, M. ; BOCK, R. ; JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald: *Hydrogen metallization in heavy ion imploded multi-layered cylindrical targets*. In: Phys. Rev. E 63 (2001), S. 016402

[Tahir u. a. 2001b] TAHIR, Naeem A. ; KOZYREVA, A. ; HOFFMANN, D. H. H. ; SHUTOV, A. ; SPILLER, P. ; NEUNER, U. ; TAUSCHWITZ, A. ; JACOBY, J. ; ROTH, M. ; MARUHN, J. A. ; BOCK, R. ; JURANEK, Hauke ; REDMER, Ronald: *Metallization of hydrogen using heavy ion imploded multi-layered cylindrical targets.* In: Contrib. Plasma Phys. 41 (2001), S. 287–290

[Ternovoi u. a. 1999] TERNOVOI, V. Y. ; FILIMONOV, A. S. ; FORTOV, V. E. ; KVITOVS. V. ; NIKOLAEV, D. N. ; PYALLING, A. A.: *Thermodynamic properties and electrical conductivity of hydrogen under multiple shock compression to 150 GPa.* In: Physica B 265 (1999), S. 6–11

[Weir u. a. 1996] WEIR, S. T. ; MITCHELL, A. C. ; NELLIS, W. J.: *Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140 GPa (1.4 Mbar).* In: Phys. Rev. Lett. 76 (1996), S. 1860

[Wigner und Huntington 1935] WIGNER, E. ; HUNTINGTON, H. B.: *On the Possibility of a Metallic Modification of Hydrogen.* In: J. Chem. Phys. 3 (1935), S. 764

[Zimmermann u. a. 1978] ZIMMERMANN, R. ; KILIMANN, K. ; KRAEFT, W. D. ; KREMP, D. ; RÖPKE, G.: *Dynamical Screening and Self-Energy of Excitons in the Electron-Hole Plasma.* In: phys. stat. sol. (b) 90 (1978), S. 175

Danksagung

Während meiner Promotionszeit sind über 20 wissenschaftliche Arbeiten entstanden. Ich besuchte über 15 Tagungen. Darunter waren auch kleine weltweite Treffen von bekannten Fachleuten der Astro-, Plasma-, Festkörper- und Hochenergiephysik. Dies danke ich vor allem dem Engagement meines Betreuers Prof. Dr. Ronald Redmer.

Wesentliche Inhalte dieser Arbeit sind in enger Kollaboration mit Werner Ebeling, Dieter Beule, Werner Stolzmann und Andreas Förster entstanden. Ihnen danke ich für die vielen Anregungen und den intensiven Austausch.

Wir können auf eine langjährige und interessante Zusammenarbeit zurückblicken, die auch von anderen Mitstreitern befruchtet worden ist. In unserer Arbeitsgruppe tauschte ich mich viel mit Volker Schwarz und Nadine Nettelmann aus. Viele Aufmunterungen erhielt ich von André Kietzmann und eine gute Unterstützung bei der Korrektur durch Wolf-Dietrich Kraeft und Angelika Kuligk. Unkompliziert war auch die Zusammenarbeit mit meinen anderen Kollegen Marina Hertzfeldt, Niels Fitzer und Sandra Kuhlbrodt.

Unsere Arbeitsgruppe war räumlich verwoben mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Gerd Röpke. Hier denke ich gerne an die häufigen Feiern anlässlich von Geburtstagen und Veröffentlichungen mit Kaffee und Kuchen zur Mittagszeit zurück. Gemeinsam wurden Weihnachtsfeiern und Ausflüge unternommen. Hier gab es viele interessante und befördernde Gespräche mit Prof. Dr. Gerd Röpke, Carsten Fortmann, Justino Madureira, Banaz Omar und Deborah Aguilera.

Während meines Forschungsaufenthaltes am Gasdynamiklabor in Chernogolovka und meiner Besuche an der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt blicke ich gerne auf die Zusammenarbeit mit Alexej Pyalling, Wladimir Ternovoi und Naeem Tahir zurück. Überaus interessante Diskussionen führte ich mit Marvin Ross, Burkhard Militzer, Mike Desjarlais, Neill Holmes, Michael Knaup, Thomas Mehlhorn, Robert Cauble und Vladimir Bezkrovniy. Besonderer Dank gilt meinen Eltern insbesondere für die Unterstützung in den letzten Wochen.

Über die Zusammenarbeit mit allen hier Aufgeführten und hier Unterschlagenen habe ich mich gefreut und wünsche auch weiterhin einen regen Austausch.

Erklärung

Erklärung nach der Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Rostock §4 (1) h)

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit

,Zustandsgleichung von Wasserstoff bei hohen Drücken im Mbar-Bereich“

selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe, keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen dazu verwendet habe und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Rostock, 29.10.2004

Hauke Juranek

Wissenschaftlicher Lebenslauf

Geburtstag: 12. November 1971
Geburtsort: Aalen
Staatsbürgerschaft: Deutsch

Ausbildung

- 1978-1980 Grundschule Aalen
- 1980-1982 Grundschule Aalen-Waldhausen
- 1982-1991 Theodor-Heuss-Gymnasium Aalen
Allgemeine Hochschulreife
- 1992-1994 Universität des Saarlandes
Diplom-Vorprüfung in Mathematik und Physik
- 1994-1995 University of Leeds
- 1995-1998 Universität Rostock
Diplom in Physik
- seit 1998 Promotionsstudent an der Universität Rostock

Forschungsaufenthalte

- 31.7.-22.8.1999 Forschungsaufenthalt im Gasdynamik-Labor
in Chernogolovka, Russland.

Lehrerfahrung

- 2001 Übungsleiter für die Thermodynamikvorlesung im Hauptstudium
- 2000 Praktikumsbetreuer für die Physikpraktika der Maschinenbaustudenten
- 1998-2001 Mitorganisator der Konferenzen „Chaos in Dynamical Systems“
in Miedzyzdroje, Polen