



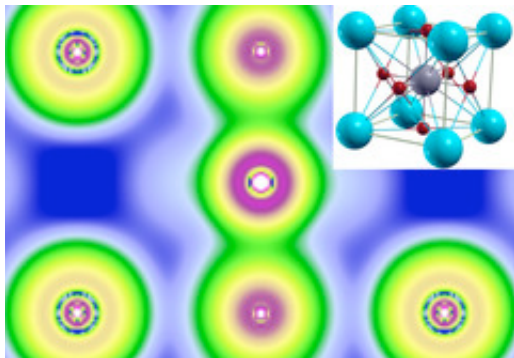
2014-07-21 [ [Florian Aigner](#) | Presseaussendung 78/2014 ]

## Neue Theorie ermöglicht Blick ins Innere der Erde

**Unter extremem Druck kann es zu Phasenübergängen kommen, die sich mit herkömmlichen Methoden nicht berechnen lassen. Durch eine neue Theorie, entwickelt an der TU Wien und der Universität Wien, wird eine genauere Analyse seismischer Wellen und ein Einblick in die innersten Eigenschaften unserer Erde möglich.**



In der Erde herrscht gewaltiger Druck - die Phasenübergänge, die sich dadurch ergeben, können nun endlich berechnet werden.



Computerberechnung der Valenzelektronendichte in Strontiumtitanat. Inset: Die Perovskit-Struktur



Oben: Andreas Tröster, Wilfried Schranz; unten: Peter Blaha, Ferenc Karsai (jeweils v.l.n.r)

Ins Innere unseres Planeten zu gelangen ist eine schwierige Aufgabe – das hat schon Jules Verne in seinem berühmten Roman "Die Reise zum Mittelpunkt der Erde" beschrieben. Auch heute noch können wir nur indirekt durch seismische Messungen Information über Struktur und Zusammensetzung der Erde gewinnen. Um solche Daten allerdings richtig interpretieren zu können, braucht man eine exakte Beschreibung der Materialien im Erdinneren. Einem Team von Wissenschaftlern der TU Wien und der Universität Wien unter Führung des theoretischen Physikers Andreas Tröster (TU Wien) gelang es nun mit Hilfe quantenphysikalischer Berechnungen, bestimmte Phasenübergänge, wie sie bei hohem Druck im Erdinneren stattfinden, mit bisher noch nie dagewesener Präzision zu beschreiben. Die neue Theorie wurde nun im Fachjournal „Physical Review X“ publiziert.

### **Hochdruckphasenübergänge geben Einblick ins Erdinnere**

Das Innere unserer Erde ist bis heute noch nicht vollständig erforscht. Bekannt ist, dass rund 60 Prozent der Erde aus siliziumhaltigen Materialien – sogenannten Perowskit-Strukturen – bestehen, der mächtige untere Mantel sogar zu 93 Prozent. Diese Mineralien sind in der Erde einem enorm großen Druck ausgesetzt. Der im Zentrum herrschende Druck von 360 Giga-Pascal entspricht einem Gewicht von zehn Millionen Elefanten auf einer Fläche von einem Quadratmeter. "Dadurch kann es unter bestimmten Bedingungen zu Hochdruckphasenübergängen kommen, bei denen sich die innere Struktur der Mineralien ändert" erklärt Trösters einstiger Doktorvater, der Materialphysiker Wilfried Schranz von der Arbeitsgruppe "Physik Funktioneller Materialien" der Universität Wien.

Die Struktur des Erdkörpers wird untersucht, indem man seismische Wellen analysiert. Ihr Ausbreitungsverhalten wird durch die elastischen Eigenschaften der Materialien im Erdinneren festgelegt. "Diese elastischen Eigenschaften können sich in der Nähe von strukturellen Phasenübergängen als Funktion von Druck und Temperatur stark ändern", erklärt Schranz. „Bis heute gibt es aber leider keinen veröffentlichten experimentellen Datensatz zu den elastischen Eigenschaften der Materialien im Erdmantel bei realistischen Druck- und Temperaturbedingungen, geschweige denn von Materialien im tiefen Erdinneren." Man ist daher auf Berechnungen angewiesen.

### **Eine Erweiterung der Landau-Theorie**

„Quantenmechanische ab-initio-Computersimulationen erlauben zwar die Berechnung von elastischen Eigenschaften von Materialien bis zu extremen Drücken, die Einbeziehung von Temperatureffekten ist dabei aber nur beschränkt möglich“, erklärt der theoretische Chemiker Peter Blaha. Phasenübergänge in Kristallen werden seit vielen Jahren mit Hilfe der „Landau-Theorie“ beschrieben. Sie erweist sich bei Drücken, mit denen wir normalerweise zu tun haben, als äußerst nützlich. „Bei hohem Druck kommt es aber zwangsläufig zu nichtlinearen Effekten, die man in der bisherigen Landau-Theorie vernachlässigen muss“, sagt Andreas Tröster. Das bedeutet zwar mathematisch eine enorme Vereinfachung, kann aber rasch zu Fehlern von sage und schreibe 100 Prozent führen. Einige Vorhersagen von Materialeigenschaften bei hohem Druck, die mit den bisher verwendeten Methoden berechnet wurden,

müssen daher vermutlich auch einer gründlichen Revision unterzogen werden.

Lange wurde daher nach einer mathematisch konsistenten Erweiterung der Landau-Theorie auf Hochdruckphasenübergänge gesucht. „Uns gelang das nun mit Hilfe von Gruppentheorie, nichtlinearer Elastizitätstheorie und quantenmechanischen Dichtefunktionalberechnungen am Computer“, erklärt Tröster: „In dieser lange gesuchten Erweiterung der Landau-Theorie wird erstmals auch der bei hohen Drücken entscheidende nichtlineare Beitrag zur elastische Energie eines Kristalls mathematisch konsistent berücksichtigt.“

Um die neue Theorie zu testen, wandte man sie auf Strontiumtitanat an, einen Perowskit, dessen Eigenschaften bereits gut bekannt sind. „Anhand dieses Schlüssel-Materials konnten wir demonstrieren, dass unsere Theorie exzellent mit den gemessenen Daten übereinstimmt“, sagt Wilfried Schranz. Das zeigt, welche hohe Qualität bei der Beschreibung von Hochdruckphasenübergängen mit Hilfe von quantenmechanischen Dichtefunktionalberechnungen erreicht werden kann. „In Zukunft werden wir durch ein enges Zusammenspiel von experimenteller Arbeit, Computersimulationen und analytischer Theorie die gewonnenen Daten in große geophysikalische bzw. seismologische Modelle integrieren können. Damit werden wir zu einem immer besseren Verständnis des Aufbaus und der Eigenschaften unserer Erde gelangen“, freut sich Andreas Tröster.

### **Publikation in "Physical Review X":**

[Andreas Tröster, Wilfried Schranz, Ferenc Karsai and Peter Blaha: "Fully consistent finite-strain Landau theory for high-pressure phase transitions", Phys. Rev. X \(2014\)](#)

### **Rückfragehinweis:**

Dr. Andreas Tröster  
Institut für Theoretische Physik  
Technische Universität Wien  
Wiedner Hauptstraße 8-10, 1040 Wien  
[andreas.troester@tuwien.ac.at](mailto:andreas.troester@tuwien.ac.at)

Prof. Wilfried Schranz  
Fakultät für Physik  
Universität Wien  
Boltzmannstraße 5, A-1090 Wien  
T: +43-1-4277-72771  
[wilfried.schranz@univie.ac.at](mailto:wilfried.schranz@univie.ac.at)

### **Aussender:**

Dr. Florian Aigner  
Büro für Öffentlichkeitsarbeit  
Technische Universität Wien  
Operngasse 11, 1040 Wien  
T: +43-1-58801-41027  
[florian.aigner@tuwien.ac.at](mailto:florian.aigner@tuwien.ac.at)



*Materials & Matter ist – neben Computational Science & Engineering, Quantum Physics & Quantum Technologies, Information & Communication Technology sowie Energy & Environment – einer von fünf Forschungsschwerpunkten der Technischen Universität Wien. Geforscht wird von der Nanowelt bis hin zur Entwicklung neuer Werkstoffe für großvolumige Anwendungen. Die Forschenden arbeiten sowohl theoretisch, beispielsweise an mathematischen Modellen im Computer, wie auch experimentell an der Entwicklung und Erprobung innovativer Materialien.*

*TU Wien - Mitglied der TU Austria*

[www.tuaustria.at](http://www.tuaustria.at)

---

Technische Universität Wien  
Karlsplatz 13, 1040 Wien, Österreich  
Tel. +43-1-58801-0  
Fax +43-1-58801-41088

Mail an den Webmaster: [webmaster@tuwien.ac.at](mailto:webmaster@tuwien.ac.at)