

Universität Wien

News > uni:view > Forschung > Blick ins Innere der Erde

uni:view MAGAZIN

Blick ins Innere der Erde

Redaktion (uni:view)

21. Jul 14



Im Inneren unserer Erde herrscht ein enorm hoher Druck.

Unter extremem Druck kann es zu Phasenübergängen kommen, die sich mit gängigen Methoden nicht berechnen lassen. Eine neue Theorie, entwickelt an der Universität Wien und der TU Wien, ermöglicht eine genauere Analyse seismischer Wellen und den Einblick in die innersten Eigenschaften unserer Erde.

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 WissenschaftlerInnen rund um Andreas Tröster von der TU Wien und seinem früheren Doktorvater Wilfried Schranz von der Universität 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 Erd-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 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 Wilfried Schranz von der Universität Wien. "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 Mitautor Peter Blaha, theoretischer Chemiker an der TU Wien.

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", so Andreas Tröster von der TU Wien, der an der Universität Wien studiert und sich habilitiert hat. 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 nach einer mathematisch konsistenten Erweiterung der Landau-Theorie auf Hochdruckphasenübergänge gesucht. Einem Team von WissenschaftlerInnen der Universität Wien und der TU Wien ist es nun erstmalig gelungen, bestimmte Phasenübergänge, wie sie bei hohem Druck im Erdinneren stattfinden, mit bisher noch nie dagewesener Präzision zu beschreiben.

"Uns gelang es nun mit Hilfe von Gruppentheorie, nichtlinearer Elastizitätstheorie und quantenmechanischen Dichtefunktionalberechnungen am Computer, eine mathematisch konsistente Erweiterung der Landau-Theorie auf Hochdruckphasenübergänge zu finden", erklärt Tröster weiter: "In dieser wird erstmals auch der bei hohen Drücken entscheidende nichtlineare Beitrag zur elastische Energie eines Kristalls mathematisch konsistent berücksichtigt."

Die Erde verstehen

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", erläutert Materialphysiker Wilfried Schranz von der Universität Wien. Das zeigt, welche hohe Qualität bei der Beschreibung von Hochdruckphasenübergängen mit Hilfe von quantenmechanischen Dichtefunktionalberechnungen erreicht werden kann.

Ziel sei es, die gewonnenen Daten durch ein enges Zusammenspiel von experimenteller Arbeit, Computersimulationen und analytischer Theorie in große geophysikalische bzw. seismologische Modelle integrieren zu können. Damit will das interdisziplinäre und interuniversitäre Team langfristig zu einem immer besseren Verständnis des Aufbaus und der Eigenschaften unserer Erde gelangen.

Das Paper "**Fully consistent finite-strain Landau theory for high-pressure phase transitions**" (Autoren: *Andreas Tröster, Wilfried Schranz, Ferenc Karsai,*

Peter Blaha) erschien am 17. Juli in dem Fachjournal *Physical Review X*.

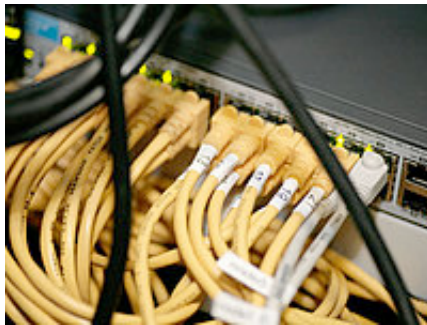
Gefällt mir

WEITERFÜHRENDE LINKS:

- > [Physik Funktioneller Materialien der Fakultät für Physik](#)
- > [Website Wilfried Schranz](#)
- > [Website Andreas Tröster](#)
- > [Technische Universität Wien](#)

LESEN SIE AUCH:

[STARTSEITE BANNERS](#) [Startseite](#)

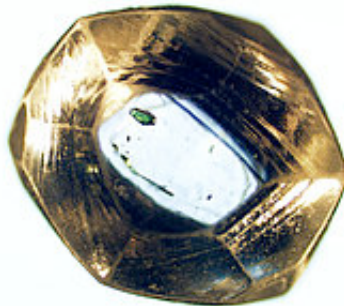


Mit dem Computer die Welt erklären

20. Mai

Die Computertechnologie entwickelt sich stetig weiter. Das eröffnet der Wissenschaft neue Möglichkeiten. Wie nutzen unsere ForscherInnen Computer, um die Welt besser zu verstehen? Wir haben uns an der Universität Wien umgeschaut. [\[weiter\]](#)

FORSCHUNG



Diamant bringt Wasser aus der Tiefe

13. Mär

Jules Verne hatte recht: Es gibt auch im Erdinneren erhebliche Mengen an Wasser. Das hat nun ein internationales ForscherInnenteam, dem auch der Mineraloge Lutz Nasdala von der Universität Wien angehört, erstmals bewiesen: Und zwar anhand eines Diamanten, der in Brasilien zu Tage gefördert wurde. [\[weiter\]](#)

FORSCHUNG



Erdbebenforschung: Wenn die Erde knistert

26. Feb

Der Materialphysiker Wilfried Schranz von der Universität Wien hat gemeinsam mit internationalen Wissenschaftlern Ähnlichkeiten zwischen Rissbildungen in Materialien und Erdbeben experimentell bestätigt. Die Ergebnisse wurden in der aktuellen Ausgabe der Fachzeitschrift "Physical Review Letters"... [\[weiter\]](#)