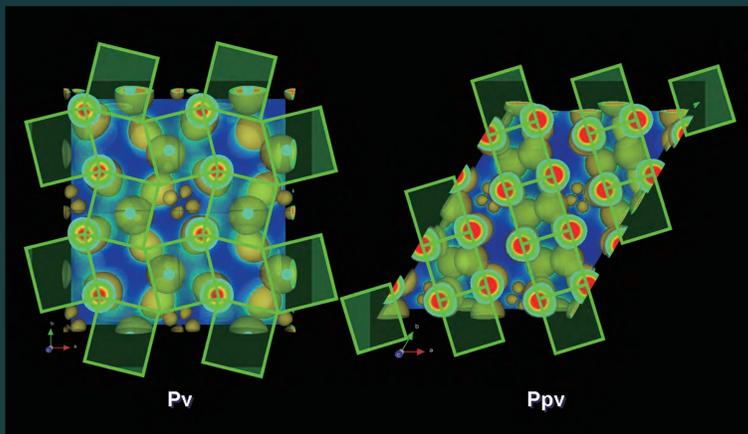


# コンピュータで地球深部を科学する

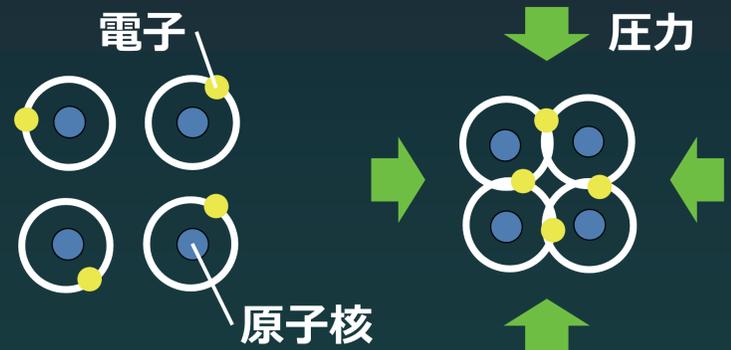


## 第一原理計算：原子や電子のミクロな動きを探る

固体物理学の基本原則である量子力学に基づき、超高压下での地球や惑星の物質の相転移や密度・弾性などの性質を解明します。珪酸塩や鉄合金など地球を構成する複雑な物質を扱うため、独自の計算手法の開発もすすめています。



第一原理計算で明らかになった、下部マントルの主要鉱物の結晶構造と電子分布。約125万気圧（深さ約2700km）でペロブスカイト構造（左）から、ポストペロブスカイト構造（右）へと相転移することがわかりました。



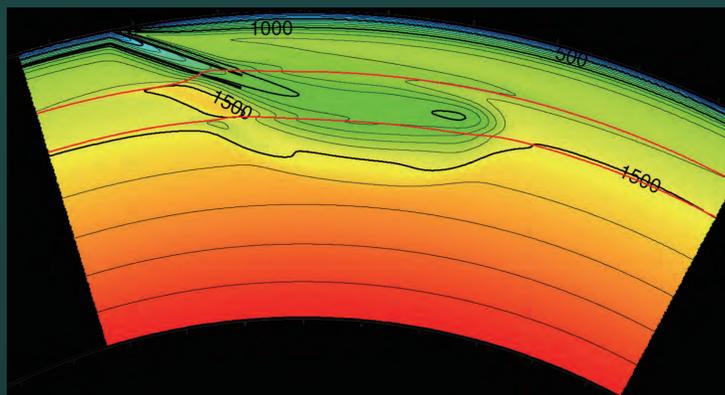
鉱物中では原子が規則正しく並んでいます。地球内部の超高压のもとでは、原子同士が近づき、配列が変わったり（構造相転移）、電子の分布が大きく変化します。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_n[n(r)] + V_H[n(r)] + V_{XC}[n(r)] \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r),$$
$$n(r) = \sum_i |\psi_i(r)|^2$$

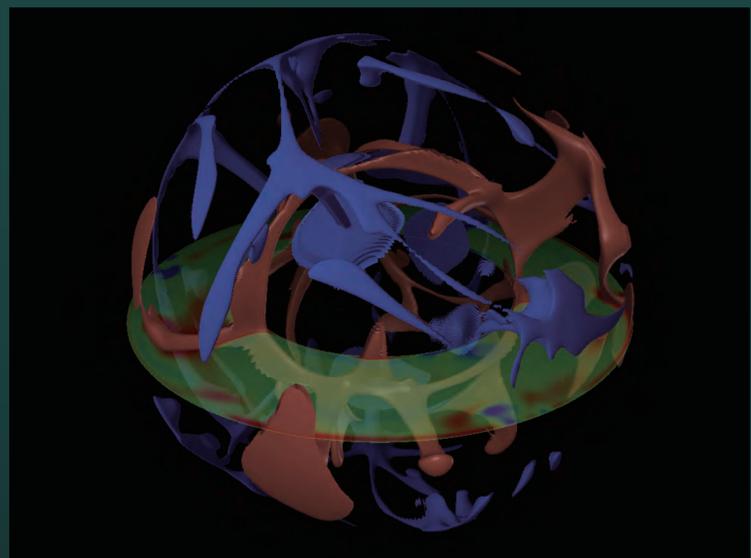
電子の運動を記述する量子力学のシュレディンガー方程式の一つ。第一原理計算では、この方程式を厳密に解いて電子の分布や性質を調べます。

## 流体力学計算：マントルと核の大規模運動を再現

流体力学・連続体力学に基づき、地球や核のダイナミックな挙動や進化過程を計算機によりシミュレーションします。実際の地球の現実的なパラメーターを用いた3次元球内の大規模な計算もおこなっています。



沈みこむプレートのダイナミクス。マントル内部の660km不連続面でプレートが留まり大きな塊（メガリス）を形成する様子が再現されています。



マントル対流の3次元シミュレーション。赤い部分が温度が高い上昇流、青が冷たい下降流です。