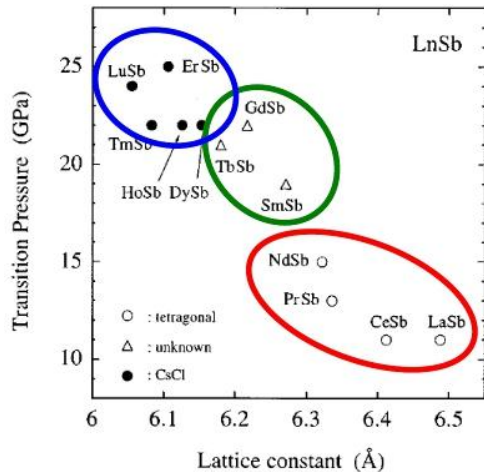


TOEPASSEN VAN EEN GENETISCH ZOEKALGORITME OP DE KRISTALSTRUCTUUR VAN LASB EN LUSB ONDER HOGE DRUK

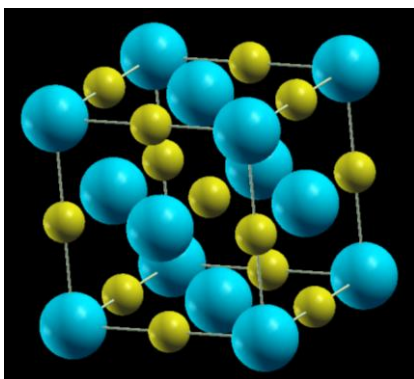
Keywords: Genetisch algoritme, B1-B2 faseovergang, Kristalstructuur, Computersimulaties, DFT



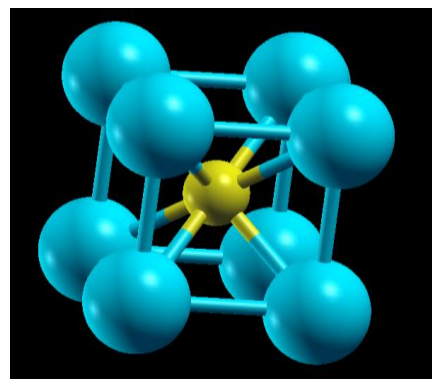
Overgangsdruk versus roosterparameter van de B1-structuur voor elk van de RSb-legeringen. De drie kleuren/symbolen wijzen op de drie verschillende soorten hoge-drukstructuren. (PRB 64 (2001) 132101)

Een legering met 50% Sb en 50% R (R=zeldzame-aardeelement) kristalliseert in de keuzoutstructuur (NaCl, ook B1 genoemd). Wanneer er uitwendige druk op deze kristallen wordt uitgeoefend, vindt er een fase-overgang plaats. Dit werd experimenteel vastgesteld door middel van X-stralendiffractiemetingen aan een synchrotron. Omdat alle zeldzame-aardeelementen zich chemisch op een gelijkaardige manier gedragen, kan je op het eerste zicht verwachten dat alle RSb-legeringen onder druk zullen transformeren naar dezelfde kristalstructuur. Dit is echter niet wat wordt waargenomen (zie figuur). Voor lichte zeldzame-aardeelementen is de hoge-drukstructuur de tetragonaal vervormde CsCl-structuur (ook B2 genoemd). Voor de zwaarste elementen blijkt het de kubische CsCl-structuur te zijn. Voor de middelzware elementen is de

hoge-drukstructuur niet eenduidig geïdentificeerd.



NaCl-type (B1)



CsCl-type (B2)

Doelstelling De bedoeling van deze thesis is om via computersimulaties op zoek te gaan naar die onbekende structuur voor middelzware zeldzame-aardeelementen. Maar hoe doe je dat? Er zijn immers

oneindig veel mogelijke kristalstructuren om te onderzoeken. Zijn er systematische manieren om de energetisch meest gunstige structuur te zoeken bij een gegeven druk? Jawel. Sinds kort kunnen kwantummechanische simulaties voor vaste stoffen gecombineerd worden met genetische zoekalgoritmes. Deze kunnen via een “survival of the fittest” strategie uit een oneindig grote zoekruimte in een eindige tijd de “beste” kristalstructuur vinden. Ongeveer zoals de Natuur er in geslaagd is om uit dode materie de meest aangepaste levende wezens te construeren voor ieder biotoop.

Van de structuur die we op deze manier vinden kunnen we een X-stralendiffractiespectrum simuleren, en dat vergelijken met het experimentele diffractiespectrum van de onbekende structuur. Uit onze berekeningen zal allicht ook blijken wat het fysisch mechanisme is dat er voor zorgt dat deze chemisch gelijkaardige verbindingen zich toch op drie kwalitatief verschillende manieren gedragen.

Promotoren: Prof. Dr. S. Cottenier – stefaan.cottenier@ugent.be (09/264.65.63), Prof. V. Van Speybroeck – veronique.vanspeybroeck@ugent.be (09/264.65.58) / **Begeleiding:** M.Sc. Kim Rijpstra – kim.rijpstra@ugent.be (09/264.65.60) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>