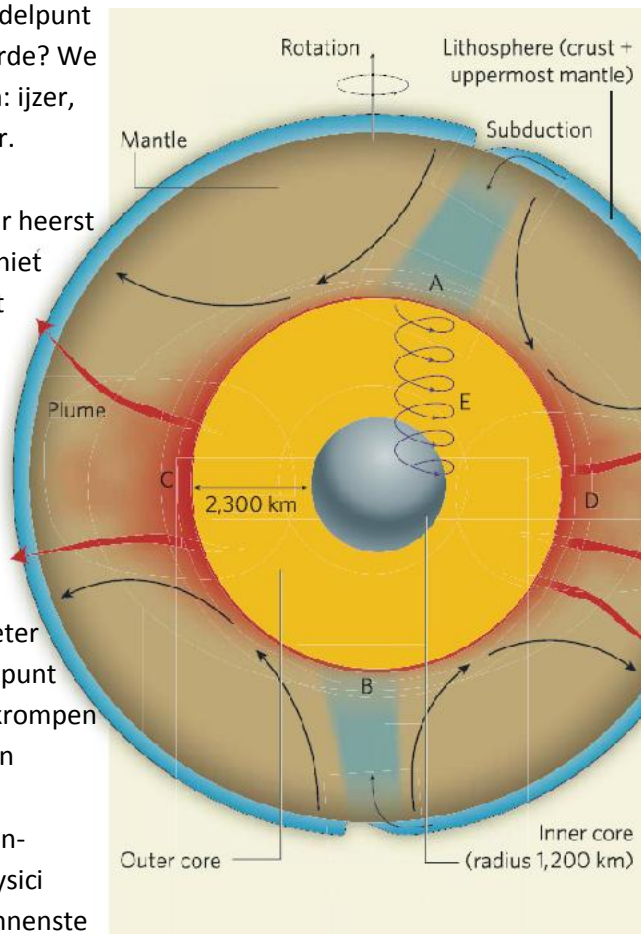


CLUSTEREXPANSIE EN DE KRISTALSTRUCTUUR VAN IJZER- NIKKELLEGERINGEN IN HET MIDDELPUNT VAN DE AARDE EN IN EXOPLANETEN

Keywords: structuurvoorspelling, fasediagram van Fe, Fe-Ni-legering, clusterexpansie, materiaalfysica, geofysica, exoplaneten, DFT, kristalstructuur

Wat zit er in het middelpunt van onze planeet Aarde? We denken het te weten: ijzer, nagenoeg zuiver ijzer. Ondanks de hoge temperatuur die daar heerst (6000 K), is dat ijzer niet gesmolten. Dat komt door de bijzonder hoge druk van 350 GPa, die er voor zorgt dat een stuk ijzer dat op het aardoppervlak de grootte van een voetbal heeft (diameter 22 cm) in het middelpunt van de planeet ingekrompen is tot een bal met een diameter van 19 cm (2/3 van het oorspronkelijk volume). Geofysici noemen dit vaste binnenste deel van de Aarde de *binnenkern* ("inner core"). De binnenkern is een reusachtige bol vast ijzer, met een straal van 1220 km.



eigenschappen, en er wordt verwacht dat een aantal van deze exoplaneten eveneens een binnenkern van ijzer kunnen bevatten, onder nog veel hogere drukken en temperaturen dan bij de aarde het geval is. Meerdere TPa (tera-pascal) zijn niet onmogelijk. Dit doet onvermijdelijk de vraag rijzen naar de structuur van ijzer in dergelijke binnenkernen. Zitten de ijzeratomen gerangschikt in een bcc-kristal, zoals voor ijzer aan het aardoppervlak? Nemen ze een andere kristalstructuur aan? Of is dit ijzer amorf?

Momenteel worden in hoog tempo planeten ontdekt in andere zonnestelsels (exoplaneten). Er is een grote spreiding op hun

Een antwoord vinden op deze vraag ligt niet voor de hand, en houdt geologen, geofysici (en sinds kort ook planetaire wetenschappers)

al decennia lang bezig. Ter plaatse gaan om een staal te nemen is uitgesloten: de diepste boringen in de Aarde gaan tot 12 km, wat maar 0.2% is van de afstand die ons scheidt van de binnenkern. Kijken wat vulkanen naar buiten spuwen is ook geen oplossing, omdat die enkel materiaal van de vloeibare mantel aanleveren. Dan maar de omstandigheden van de binnenkern nabootsen in een labo? Een combinatie van een dergelijke druk en temperatuur is experimenteel helaas nog niet haalbaar gebleken.

De beste kandidaat om ijzer onder deze omstandigheden te bestuderen zijn kwantummechanische computersimulaties. Voor een gegeven kristalstructuur kan hiermee de energie berekend worden bij een gegeven druk en temperatuur. De kristalstructuur met de laagste energie is dan degene die ook in het middelpunt van de Aarde of in exoplaneten zou moeten voorkomen.

Klein detail: hoe beslis je welke kristalstructuren je zo gaat onderzoeken? Het aantal mogelijkheden is eindeloos... Structuurvoorspellingstechnieken zoals random search, genetische algoritmes en simulated annealing bieden hier een uitkomst. Recent onderzoek binnen het CMM heeft op deze manier bevestigd dat zuiver Fe op lage temperatuur een tot voor kort niet verwachte fase-overgang van de hcp naar de fcc structuur maakt, bij een druk van 8 TPa (deze gigantische druk kan allicht voorkomen in sommige exoplaneten).

De vraag die we binnen deze thesis willen bestuderen is hoe deze fase-overgang afhangt van de verontreiniging van ijzer. In de aardse binnenkern komt immers tot 10% Ni voor. Het materiaal van de binnenkern is dus eigenlijk een Fe-Ni-legering. Leidt dat tot de vorming van een configurationeel wanordelijk materiaal, of eerder tot geordende kristallen? Is dat bij elke druk hetzelfde of niet? Is de overgang naar fcc nog aanwezig als er Ni voorkomt, of niet?

De methode die hiervoor gebruikt zal worden, is clusterexpansie. Hiermee wordt informatie verkregen uit een klein aantal kwantumberekeningen voor geordende Fe-Ni-kristallen betrouwbaar geëxtrapoleerd naar configuraties met configurationele wanorde.

Promotoren: Prof. Dr. Stefaan Cottenier – stefaan.cottenier@ugent.be (09/264.65.63), Prof. Dr. Michel Waroquier – michel.waroquier@ugent.be (09/264.65.59) / **Begeleiding:** ir. J. Jaeken – jan.jaeken@ugent.be (09/264.66.37) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>