

1. Bachelor project :

Toegepaste Fononen:

Van trillende defecten tot ademende materialen.

In theoretische vaste stoffysica worden kwantum mechanische berekeningen standaard uitgevoerd zonder het in rekening brengen van de temperatuur. Deze aanpak heeft over de jaren zijn vruchten afgeworpen en laat toe experimentele resultaten zeer goed in eerste orde te benaderen.

Om nog betere overeenstemming met experimentele resultaten te kunnen bekomen, of om de rol van temperatuur op de eigenschappen van materialen te kunnen begrijpen is het echter nodig om temperatuur ook mee te nemen in de modelering. In het geval van modelering op de atomaire schaal kan dit door het fononspectrum te berekenen vanuit de dynamische matrix van het bestudeerde systeem:

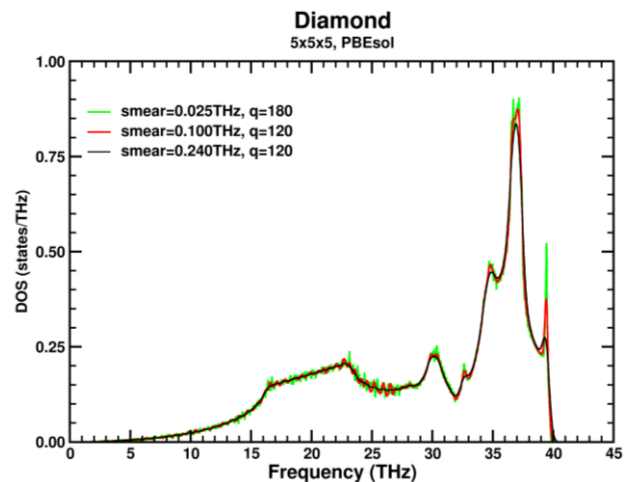
$$D(q) = \sum_{R=1}^{\infty} \begin{bmatrix} \frac{\varphi(N_1, M_1^R)}{\sqrt{m_1 m_1}} e^{iq \cdot (r_{N_1} - r_{M_1^R})} & \frac{\varphi(N_1, M_2^R)}{\sqrt{m_1 m_2}} e^{iq \cdot (r_{N_1} - r_{M_2^R})} & & \\ \frac{\varphi(N_2, M_1^R)}{\sqrt{m_1 m_2}} e^{iq \cdot (r_{N_2} - r_{M_1^R})} & \frac{\varphi(N_2, M_2^R)}{\sqrt{m_2 m_2}} e^{iq \cdot (r_{N_2} - r_{M_2^R})} & \cdots & \\ & \vdots & \ddots & \\ & & & \frac{\varphi(N_n, M_n^R)}{\sqrt{m_n m_n}} e^{iq \cdot (r_{N_n} - r_{M_n^R})} \end{bmatrix}$$

Hiervoor dient de volgende eigenwaarde vergelijking

$$D(q)e_i = \omega_i(q)^2 e_i$$

opgelost te worden in elk punt q van de eerste Brillouin zone. Integratie over de volledige eerste Brillouin zone levert dan het gewenste fononspectrum. In het geval van zuiver diamant wordt het spectrum bekomen dat in de figuur hiernaast te zien is. Op basis van zo een fononspectrum is het mogelijk om de temperatuurbijdrage tot de energie van een systeem te berekenen. Het is eveneens mogelijk de warmtecapaciteit van een materiaal en de thermische stabiliteit van verschillende fasen van een materiaal te bepalen.

In dit project, zal de student de fononspectra van verschillende materialen berekenen en in detail onderzoeken en vergelijken. Hierbij zullen zowel eenvoudige materialen, zoals diamant, als uiterst complexe materialen zoals Metaal-Organische Raamwerken aan bod komen. De student zal voor verdere en diepgaandere analyse de nodige tools implementeren in een bestaand programma, om zo eigenschappen te kunnen bepalen welke afgeleid kunnen worden uit het fononspectrum.

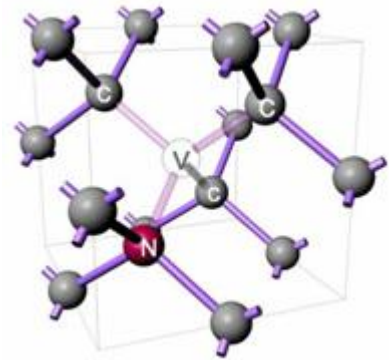


2. Bachelor project :

Stikstof-Vacature complexen in diamant:

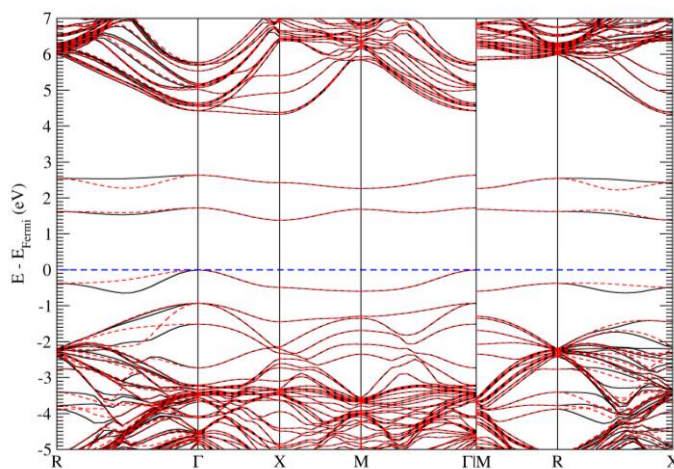
Wie zijn ze? Wat doen ze? En wat kunnen we ermee?

Het stikstof-vacature complex (NV-centrum) is een van de meest besproken en bestudeerde punt defecten welke in zuiver diamant aanwezig is. Het is een fotoluminescent defect waarbij deze fotoluminescentie zelfs van individuele defecten gedetecteerd kan worden. Verder is het ook mogelijk de spins van de ongepaarde elektronen rond de vacature te beïnvloeden met behulp van magnetische velden. Dit gedrag samen met de mogelijkheid van het gestructureerd inbouwen van deze centra in diamant zorgt ervoor dat deze NV-centra vaak voorgesteld worden als mogelijke qubits; de bouwstenen van de toekomstige kwantumcomputer.



Figuur 1 Bal-en-stok voorstelling van het NV-defect

Tijdens dit project zal de student de fundamentele eigenschappen van het NV-complex bestuderen. Hiervoor zal hij/zij gebruik maken van het VASP software pakket (een efficiënt programma voor het uitvoeren van kwantummechanische simulaties op de atomaire schaal). De zo op de supercomputer bekomen resultaten zullen dan verder geanalyseerd worden.



Figuur 2 Bandestructuur van het vacature defect in diamant.

Hierbij zal de elektronische structuur van het defect complex worden bestudeerd en vergeleken met deze van het vacature defect en van het N-substitutionele defect.

De elektronische bandenstructuur (zoals er een voorbeeld te zien is in de figuur hiernaast) zal een centrale rol spelen in deze studie. Daarnaast zal ook de ladingsoverdracht tussen het defect en de omgeving worden bestudeerd. Hiervoor zal gebruik worden gemaakt van een "atomen-in-molecul" partitioneringsschema, waarmee de kwantummechanisch berekende elektronendichtheid wordt

opgedeeld tussen de verschillende atomen van het systeem.