
Prédiction de chlorures d'hydrogène HxCly stables sous haute pression par algorithme évolutionnaire USPEX et calculs DFT

Gilles Frapper*¹

¹INSTITUT DE CHIMIE DES MILIEUX ET MATERIAUX DE POITIERS (IC2MP) – Université de Poitiers, CNRS : UMR7285 – 4, rue Michel IC2MP UMR 7285 Université de Poitiers – CNRS, 4, rue Brunet (bât. B27) - TSA 51106 - 86073 Poitiers Cedex 9, France, France

Résumé

La détermination de phases cristallines de chlorures d'hydrogène HxCly sous haute pression est réalisée à l'aide de l'algorithme évolutionnaire USPEX combiné à des calculs DFT PAW périodiques. Le système binaire H-Cl est exploré entre 0 et 500 GPa. Plusieurs phases sont localisées, stables thermodynamiquement à la pression donnée. Le calcul du spectre de phonons permet de caractériser ces structures comme étant des minima locaux. A 100 GPa, une phase H₄Cl est énergétiquement la plus stable et présente des chaînes en zig-zag(H₂Cl₂)_x intercalées entre des feuillets de chlore de structure Kagomé tandis qu'une magnifique structure H₈Cl₄ est localisée à 300 GPa, composée de feuillets interpénétrés de chlore graphène-like où des entités moléculaires H₃⁺ et H₂ occupent les canaux. Finalement, d'autres structures contiennent quant à elles le cluster moléculaire H₅⁺ stabilisé par le sous-réseau chlore/chlorures d'hydrogène. Certaines structures présentent des propriétés de superconduction comme celles rencontrées dans BH.

Mots-Clés: algorithme évolutionnaire, USPEX, haute pression, structures cristallines

*Intervenant