



Doctoral Thesis

Computational crystal structure prediction

Author(s):

Glass, Colin W.

Publication Date:

2008

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005779254> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Computational Crystal Structure Prediction

A dissertation submitted to
ETH ZUERICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by
Colin William Glass
Dipl. Masch. -Ing. ETH
born 7th of July 1980
citizen of Bern

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Artem R. Oganov, ETH Zürich & Moscow State University, examiner

Prof. Dr. Walter Steurer, ETH Zürich, co-examiner

Prof. Dr. Alberto Garcia, CSIC, Barcelona, co-examiner

Abstract – English

Although addressed by researchers around the world, the problem of computational crystal structure prediction could not be resolved for decades. Finally, a method emerged from this thesis putting an end to Maddox's scandal of 1988: 'One of the continuing scandals in the physical sciences is that it remains in general impossible to predict the structure of even the simplest crystalline solids from a knowledge of their chemical composition.' Maddox states carbon and ice at ambient pressure as two examples, both of which were successfully solved by the new method. Furthermore, it has already uncovered ground states of many systems from chemical composition – some of which previously evading scientific scrutiny for years – and it continues doing so. The method is very reliable up to approximately 30 atoms/unit cell. With increasing system size, the search space grows exponentially and the reliability decreases.

Abstract – German

Die Struktur kristalliner Festkörper ist von zentraler Bedeutung. Von ihr lassen sich zahlreiche Eigenschaften des Materials routinemässig ableiten. Es ist jedoch nicht immer einfach die Struktur zu bestimmen. Der seit jeher erfolgreichste Ansatz ist Röntgenbeugung. Die Beugung der Röntgenstrahlen erfolgt am Atomgitter. Aufgrund der periodischen Anordnung der Atome entstehen klare Beugungsmuster, die wiederum zur Struktur invertiert werden können. Dieser Ansatz hat jedoch seine Grenzen, wie dies beispielsweise bei sehr hohem Druck der Fall ist. Das Interesse an den Strukturen ist aber auch da gegeben und es sind andere Ansätze erforderlich. In dieser Dissertation wurde eine computergestützte Methode für die Bestimmung von Kristallstrukturen entwickelt. Dies wird generell als schwierige und wichtige Aufgabe gewertet. Schon seit Jahrzehnten suchten Forscher nach solchen Methoden, doch konnte keine den praktischen Anforderungen genügen. Mit der hier entwickelten Methode ist es nun möglich, ohne jegliche experimentelle Vorkenntnisse die Struktur von Materialien mit bis zu ca. 30 Atomen/Zelle sehr zuverlässig zu bestimmen. Dies stellt ein gewaltiger Schritt nach vorne dar. Mit Hilfe dieser neuen Methode wurden bereits zahlreiche bis dato unbekannte Strukturen von Hochdruck-Materialien entdeckt und publiziert.