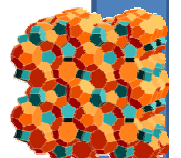


Energiatehokkuutta parantavien materiaalien tutkimus

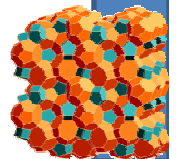
Antti Karttunen

Nuorten Akatemiaklubi 2010-01-18



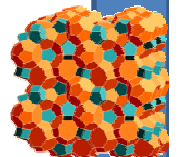
Sisältö

- Tutkimusmenetelmät:
 - Laskennallinen materiaalitutkimus teoreettisen kemian menetelmillä
- Esimerkki tutkimusongelmasta:
Energiatehokkuutta parantavat materiaalit
 - Uudet energiatehokkaat valonlähteet
 - Jätelämmön tehokkaan hyödyntämisen mahdollistavat materiaalit



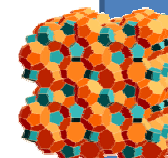
Teoreettinen kemia

- Teoreettisen kemian menetelmät perustuvat kvanttimekaniikkaan
- Kvanttimekaniikka tarjoaa matemaattisen koneiston, jolla kaikki kemialliset ilmiöt voidaan periaatteessa kuvata eksaktisti
- Ongelmien ratkaiseminen eksaktisti on kuitenkin käytännössä mahdotonta
 - Tarvitaan likimääräisiä laskentamenetelmiä (ja laskentatehoa!)



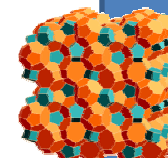
Teoreettinen kemia + tietokoneet = laskennallinen kemia

- 1950-luvulla teoreettisessa kemiassa otettiin muutamia ratkaisevia edistysaskeleita likimääräisten menetelmien osalta
- Samoihin aikoihin myös tietokoneet alkoivat tulla tutkijoiden käyttöön, joten teoreettisen kemian ongelmia alettiin pian ratkoa laskennallisesti tietokoneiden avulla
 - Laskennallinen kemia (molekyylimallinnus, materiaalimallinnus, jne)



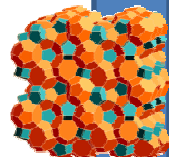
Laskennallinen kemia

- Tietotekniikan nopea kehitys on ollut erittäin tärkeää myös laskennallisen kemian kehitykselle
 - Myös lukuisat tietojenkäsittelytieteen ja sovelletun matematiikan tutkimustulokset ovat olleet erittäin merkittäviä alan kannalta
- Tietotekniikan kehityksen rinnalla jatkuva teoreettisen kemian ”kynä ja paperi”-tason menetelmänkehitys on myös vähintäänkin yhtä olennaisessa roolissa
 - Uusien teoreettisten menetelmien muuntaminen tehokkaaksi ohjelmakoodiksi on usein valtava urakka



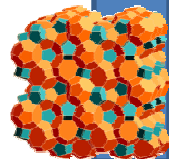
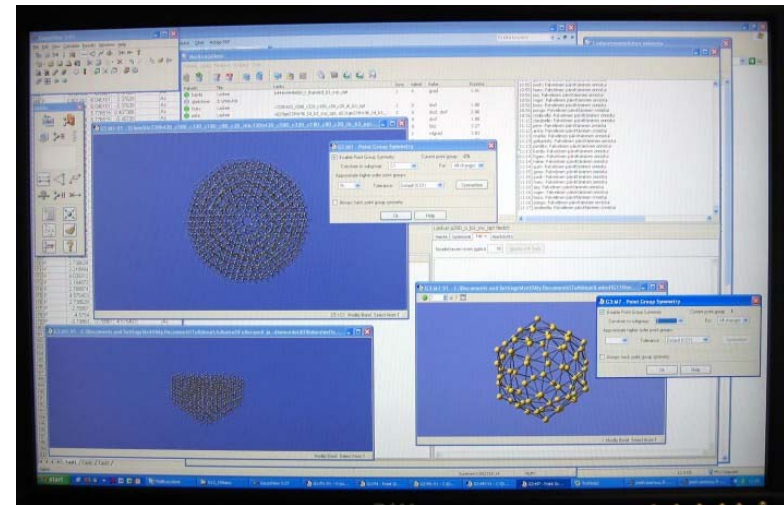
Laskennallinen kemia tutkimusmenetelmänä

- Laskennallisen kemian menetelmillä tutkitaan aivan samoja ongelmia kuin kokeellisillakin menetelmillä (menetelmien tarkkuuden rajoissa)
 - Teorian avulla pystytään monesti selittämään ja tulkitsemaan kokeellisia tuloksia
 - Laskennallisesti voi olla myös mahdollista ennustaa uudentyyppisten yhdisteiden olemassaolo ja ominaisuudet ennen niiden kokeellista valmistusta
- Yhteistyö kokeellisen tutkimuksen kanssa on ensiarvoisen tärkeää
 - Tutkimusongelmasta riippuen laskennallinen tutkimus voi ohjata kokeellista työtä tai päinvastoin



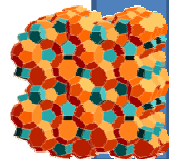
Tutkimusvälineet ja käytännön tutkimustyö

- Laskentakoneet ja -ohjelmistot



Esimerkki tutkimusongelmasta

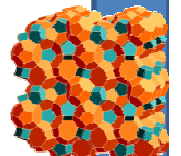
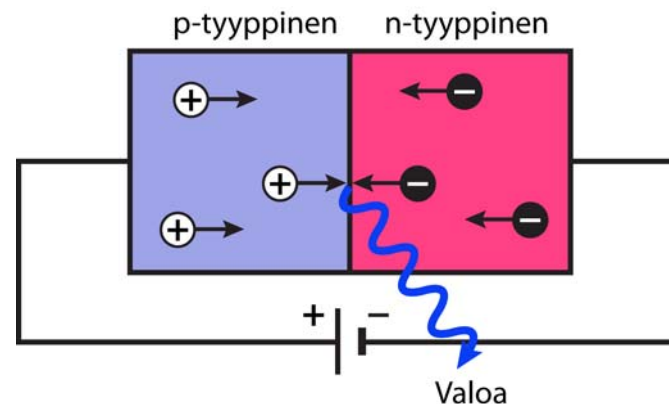
- Uusien mikrohuokosellisten puolijohdemateriaalien suunnittelu materiaalimallinnuksen avulla
- Potentiaaliset sovelluskohteet:
 - Optoelektroniset, eli valoon liittyvät sovellukset, kuten uudet energiatehokkaat valonlähteet
 - Termoelektriset, eli lämpöön liittyvät sovellukset, kuten jätelämmön muuntaminen sähköksi



Uudet energiatehokkaat valonlähteet

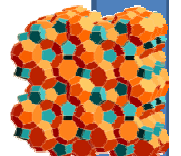
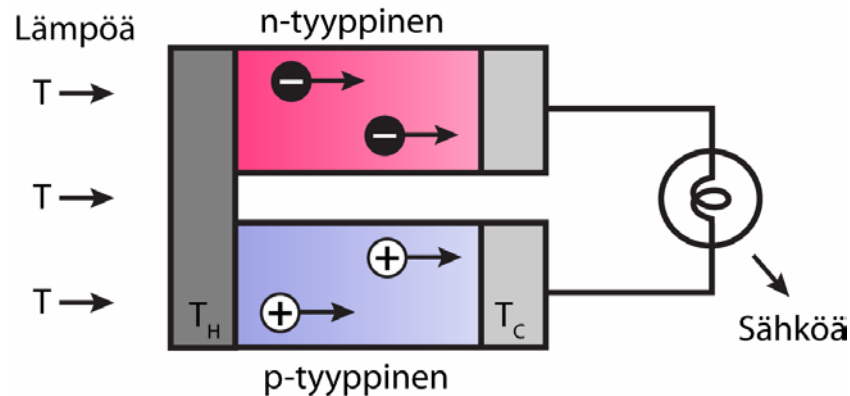
- Tyypillinen esimerkki energiatehokkaista valonlähteistä ovat epäorgaanisista puolijohdemateriaaleista koostuvat LED-valot (light-emitting diode)
- LED-valojen etuja perinteisiin valonlähteisiin verrattuna: Energiatehokkuus, pitkäikäisyys, kestävyys, viileys, koko.
- LED-valojen suurin puute on ollut niiden suhteellisen heikko valotehokkuus, mutta tässä suhteessa ne ovat jo ohittaneet hehkulampun

Kuva: Wikipedia



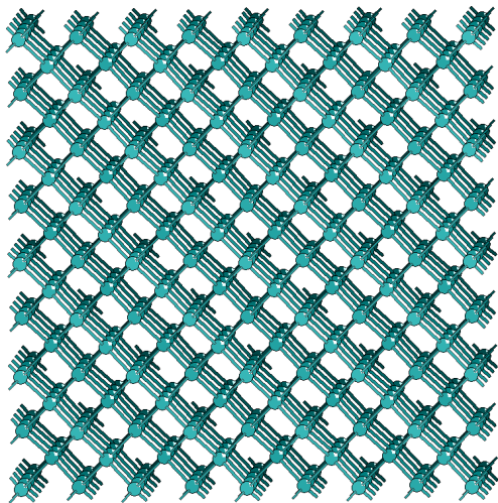
Termoelektriset materiaalit: Jätelämmön hyödyntäminen

- Termoelektriset materiaalit voivat tuottaa sähköä lämmöstä tai jäähdyttää sähkövirralla
- Termoelektrinen ilmiö on tunnettu jo 1800-luvun alkupuolelta lähtien ja sillä on useita sovelluksia pienen mittakaavan energiantuotannossa ja jäähdytyksessä
- Tunnetut termoelektriset materiaalit eivät sovellu jätelämmön hyödyntämiseen suuressa mittakaavassa
 - Uusilla materiaaleilla voitaisiin parantaa huomattavasti energiantuotannon tehokkuutta

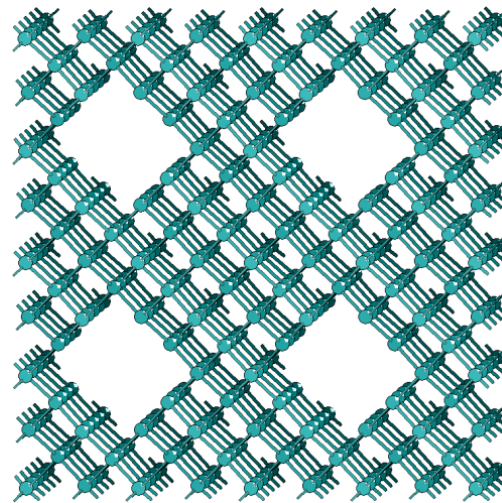


Mikrohuokoselliset puolijohdemateriaalit

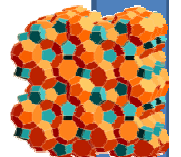
- Useilla teknologisesti tärkeillä puolijohdemateriaaleilla (esim. piillä) on tiheä, verkkomainen atomitason rakenne, jonka optoelektroniset ja termoelektriset ominaisuudet ovat huonot
- Mikrohuokosellisten puolijohdemateriaalien atomitason rakenne sisältää huokosia, joiden halkaisija on alle 2 nm ($\text{nm} = 10^{-9} \text{ m}$)
- Mikrohuokosellisten puolijohdemateriaalien optoelektroniset ja termoelektriset ominaisuudet poikkeavat tiheämpien puolijohteiden vastaavista ominaisuuksista



Normaali atomitason rakenne

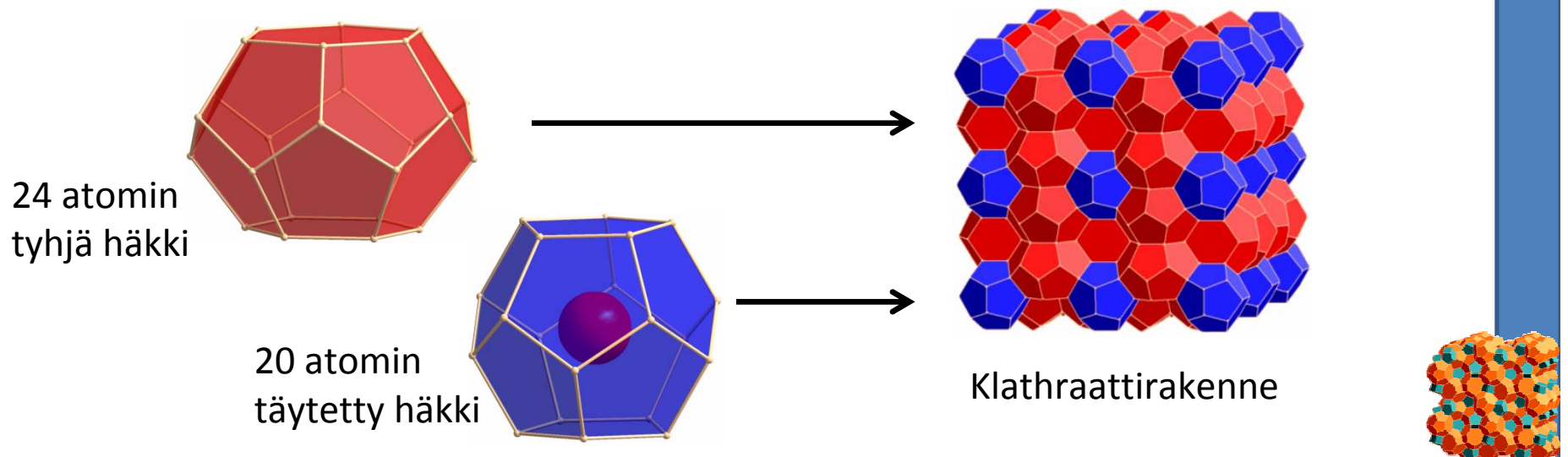


Huokosellinen atomitason rakenne

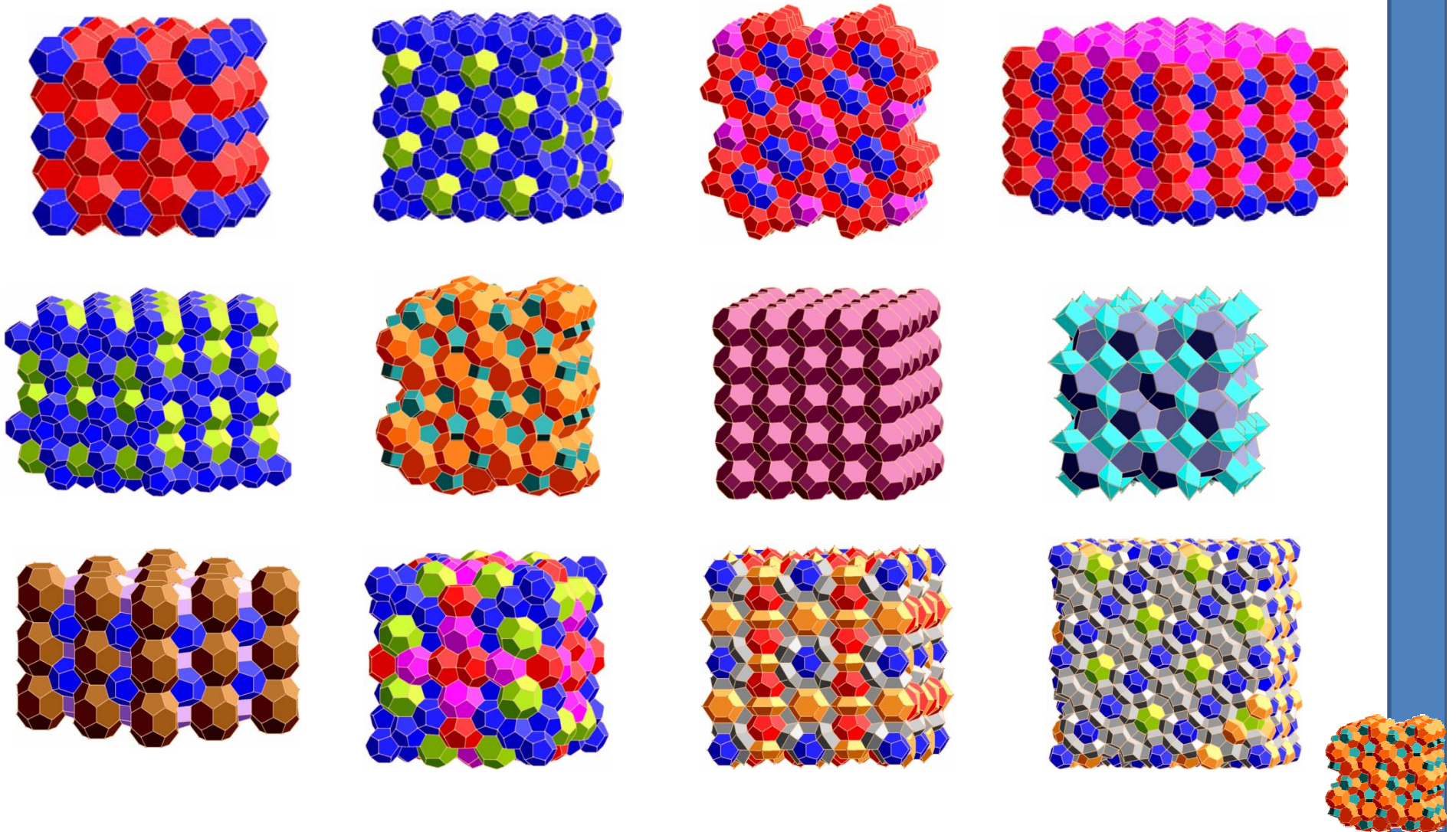


Mikrohuokoselliset puolijohdemateriaalit

- Hyvä esimerkki mikrohuokosellisista puolijohteista ovat ns. klathraattityyppiset materiaalit
- Klathraatit koostuvat pienistä yhteenliittyneistä atomihäkeistä (materiaalina esim. pii, germanium tai tina)
- Häkit voivat olla tyhjiä tai ns. vierasatomeilla täytettyjä
 - Tyhjät häkit -> Optoelektroniset (valoon liittyvät) sovellukset
 - Täytetyt häkit -> Termoelektriset (lämpöön liittyvät) sovellukset

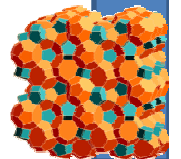


Mikrohuokosellisia rakennetyyppejä



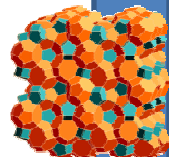
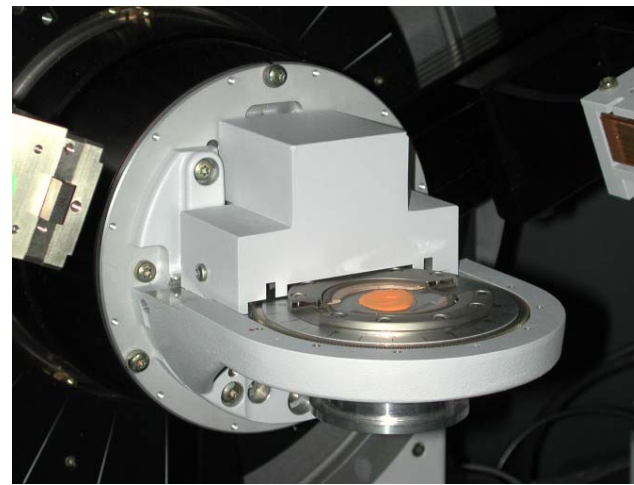
Materiaalimallinnuksen edut tutkimusmenetelmänä

- Uusien mikrohuokosellisten puolijohdemateriaalien valmistaminen kokeellisesti ilman tarkempaa tietoa koostumuksesta ("reseptistä") on työlästä ja aikaavievää
- Materiaalimallinnuksen avulla on mahdollista etsiä systemaattisesti uusia rakennevaihtoehtoja, joista parhaat voidaan ottaa kokeellisen työn kohteiksi
- Materiaalimallinnuksen avulla olemme pystyneet kartoittamaan systemaattisesti lukuisia erilaisia atomitason rakennemalleja sekä niiden pysyvyyksiä ja valontuotto-ominaisuuksia



Tutkimuksen tavoitteet

- Kokeellisesti realististen mikrohuokosellisten materiaalien mallinnus
 - Tuloksena ”reseptejä” uusille materiaaleille
- Kokeellisten lähestymistapojen suunnittelu yhdessä yhteistyökumppaneiden kanssa (Prof. Thomas Fässler, Münchenin Teknillinen yliopisto)



Yhteenveto

- Materiaalimallinnus on tehokas menetelmä uusien materiaalien atomitason rakenteen ja ominaisuuksien ennustamiseen
- Laskennallisten ja kokeellisten menetelmien yhdistäminen auttaa ymmärtämään kemiallisia ilmiöitä paremmin



Laskennallisen kemian ryhmä (UEF/kemian laitos)



ITÄ-SUOMEN YLIOPISTO



Euroopan unioni
Euroopan aluekehitysrahasto

Vipuvoimaa
EU:lta
2007-2013


Tekes

