

Väitöstiedote

Väitös 02.10.2020

Supertietokoneet termosähkoisten materiaalien suunnittelussa

Väitöskirjan nimi	Lattice dynamics in 2D layered transition metal oxides and sulfides: First principles study
Väitöskirjan sisältö	Maailman energiatarve kasvaa jatkuvasti teknisen kehityksen myötä. Tämä vaatii uusien energia tuotantomuotojen valjastamista ja nykyisen energian tehokkaampaa käyttöä. Esimerkiksi iso osa polttoprosessien kautta tuotetusta energiasta häviää ilmakehään hukkalämpönä ja johtaa teollisuuden mittakaavassa merkittäviin menetyksiin. Termosähköiset materiaalit muuntavat lämpötilaeroja sähköenergiaksi ja tämän seurauksena voivat auttaa ratkaisemaan hukkalämpöongelman. Termosähköiset laitteet ovat kestäviä ja luotettavia ja sen vuoksi niitä käytetäänkin jo paikoissa, joissa laitteiden huolto on vaikeaa tai mahdotonta (kuten avaruudessa). Termosähköiset laitteet ovat myös äänettömiä ja niitä voidaan yhdistää tekstiileihin tuottamaan sähköä jopa ihmisen ruumiinlämmöstä. Hyvistä ominaisuuksistaan huolimatta nykyisten termosähköisten materiaalien hyötysuhde on matala ja koska ne ovat melko myrkyllisiä ja kalliita, niitä ei voida käyttää laajassa mittakaavassa. Parempien termosähköisten materiaalien etsiminen yrityksen ja erehdyksen kautta ei ole tehokas lähestymistapa. Tässä teoreettinen lähestyminen ja jatkuvasti kasvava laskennallinen teho tulee avuksi. Se mahdollistaa termosähköisten ominaisuuksien ennustamisen perustuen materiaalien atomitaso rakenteeseen ja auttaa löytämään hyviä uusia materiaalivaihtoehtoja päättäen mahdollisesti hyvät vaihtoehdot. Laskennallisessa työskentelyssä on tärkeää löytää "kultainen keskite", jossa käytettävät laskentamenetelmät ovat tarpeeksi tarkkoja toistaakseen tunnetut kokeelliset tulokset, mutta silti riittävän nopeita, jotta tuloksia voidaan saada riittävän nopeasti. Tässä väitöskirjassa laskennallisen tutkimuksen pääkohteena on hilälämmönjohtavuus, joka on tärkeä termosähköinen suure. Työssä tutkitaan kerroksellisia siirtymämetallioksiedeja ja -sulfideja käyttäen kvanttikemiallisia hybriditiheysfunktionaalimenetelmiä Saatujen tuloksien perusteella hybriditiheysfunktionaalimenetelmillä voidaan luotettavasti ja kohtuullisilla laskennallisilla resursseilla kuvata näiden kerroksellisten materiaalien termosähköisiä ominaisuuksia ilman systeemikohtaista parametrisointia. Vaikka menetelmien tarkkuutta on edelleen mahdollista parantaa, käytetyillä menetelmillä on mahdollista tehdä luotettavia ennusteita suurelle joukolle olemassa olevia tai hypoteettisia termosähköisiä materiaaleja.
Väitöskirjan ala	Epäorgaaninen kemia
Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot	Filosofian maisteri Nina Mattila nina.mattila@aalto.fi
Väitöksen ajankohta	02.10.2020 klo 12
Paikka	https://aalto.zoom.us
Vastaväittäjä(t)	Professori Matti Alatalo, Oulun Yliopisto, Suomi
Valvoja	Professori Antti Karttunen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aaltodoc.aalto.fi/
Avainsanat	Termosähköiset materiaalit, tiheysfunktionaaliteoria, hilälämmönjohtavuus, kaksidimensionaaliset materiaalit

Press release

Defence on 2 October 2020

Supercomputers in thermoelectrics design

Title of the doctoral thesis	Lattice dynamics in 2D layered transition metal oxides and sulfides: First principles study
Content of the doctoral thesis	The world's needs in energy is constantly growing along with the technical progress. That leads to the search for not only new energy sources, but also more effective usage of the energy we already have. For instance, large portion of energy produced by combustion processes is lost to the atmosphere as a waste heat, and in a large, industrial scale such loss is significant. Thermoelectric materials generate electricity from temperature differences, and hence, can help with this problem. Thermoelectric devices are durable and stable and can be used in places that are hard to maintain (e.g. space), they are silent and can be used on fabrics to generate electricity from even the human body heat. Despite all the benefits, current thermoelectrics have low energy conversion efficiency, are rather toxic and expensive, preventing their use in a global scale. Searching for better options by trial-and-error experimental approach throughout infinite amount of possible compositions, alloys and structures is impractical. Here the theoretical approach and constantly growing computational power comes along. It allows to calculate the properties that are essential for thermoelectric efficiency based on materials structure, determining possible material candidates. Calculations taking all possible factors into account would take forever, while too simplified ones would not be accurate, so the "golden middle way" has to be found and tested on already known materials. The computational work in this thesis focuses on lattice thermal conductivity, a key thermoelectric parameter, of layered transition metal oxides and sulfides using hybrid density functional theory. According to the results, hybrid density functional methods describe the studied layered materials without system-dependent parametrization and with reasonable computational costs. Even though there are ways to improve the accuracy, current level of theory showed high potential towards prediction of properties for large amount of existing and hypothetical materials.
Field of the doctoral thesis	Inorganic chemistry
Doctoral candidate and contact information	M.Sc. Nina Mattila nina.mattila@aalto.fi
Defence date and time	2 nd October 2020 at 12
Place of defence	The public defense will be organized via remote technology. Follow defence: https://aalto.zoom.us
Opponent(s)	Professor Matti Alatalo, University of Oulu, Finland
Custos	Professor Antti Karttunen, Aalto University, School of Chemical Engineering
Link to electronic thesis	https://aaltodoc.aalto.fi/
Keywords	Thermoelectrics, lattice thermal conductivity, density functional theory, two-dimensional materials.