



Väitöstiedote

23.01.2019

Hiilinanoputkiverkkojen sähkönjohtavuutta voidaan kasvattaa adsorboituneiden siirtymämetalliatomien ja molekyylien avulla

Väitöskirjan nimi	Electrical conductivity of functionalised carbon nanotube networks Funktionalisoitujen hiilinanoputkiverkkojen sähkönjohtavuus
Väitöskirjan sisältö	<p>Hiilinanoputkiverkoissa suuri määrä hiilinanoputkia muodostaa läpinäkyvän, taipuvan ja sähköä johtavan ohutkalvon, jota voidaan käyttää elektrodina optoelektroniiikan sovelluksissa kuten kosketusnäytöissä tai aurinkokennoissa. Ohutkalvoissa tärkeää on hyvä sähkönjohtavuus, jota voidaan parantaa käsittelemällä hiilinanoputkiohutkalvot siirtymämetalliatomeilla tai tavanomaisilla hapoilla, mikä on todettu aiemmissa kokeellisissa tutkimuksissa. Tässä työssä tarkastellaan laskennallisesti siirtymämetalliatomien ja käsittelyssä syntyvien molekyylien (esimerkkeinä kultakloridi- ja nitraattimolekyylit) vaikutusta hiilinanoputkiin. Molempien tapojen ennustetaan kasvattavan hiilinanoputkien välisten liitosten ja koko verkon sähkönjohtavuutta.</p> <p>Työn menetelmät perustuvat tiheysfunktionaaliteoriaan yhdistettynä elektronikuljetuslaskuihin. Simuloinnit suoritetaan tietokoneohjelmilla, joita ajetaan isoissa laskentaklustereissa. Tulosten perusteella liitoksessa, jossa hiilinanoputket linkittyvät toisiinsa siirtymämetalliatomilla, eri osien molekyyliorbitaalit kytkeytyvät voimakkaasti keskenään, mikä selittää merkittävän sähkönjohtavuuden kasvamisen. Toisessa lähestymistavassa kultakloridi- ja nitraattimolekyylit sitoutuvat nanoputkien pinnalle, mistä seuraa varauksenkuljettajien määrän kasvu putkessa. Tämä seostusilmiö on myös hyvin vakaa. Lisäksi tulosten mukaan puolijohtavien hiilinanoputkien sähkönjohtavuus kasvaa enemmän kuin metallisten putkien sähkönjohtavuus. Työn tulokset auttavat ymmärtämään viimeaikaisia kokeellisia tuloksia ja ovat hyödyllisiä kehitettäessä uusia laitesovelluksia.</p>
Väitöskirjan ala	Teknillinen fysiikka, teoreettinen ja laskennallinen fysiikka
Väittelijä	Tomi Ketolainen, DI
Väitöksen ajankohta	08.02.2019 klo 13
Paikka	Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulun sali M1, Otakaari 1, Espoo
Vastaväittäjä	professori Mads Brandbyge, Danmarks Tekniske Universitet, Tanska
Kustos	professori Martti Puska, Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulu, teknillisen fysiikan laitos
Elektroninen väitöskirja	http://urn.fi/URN:ISBN:978-952-60-8384-1
Väittelijän yhteystiedot	Tomi Ketolainen University of Ostrava 0503671861 tomi.ketolainen@osu.cz