



Väitöstiedote

03.06.2019

Kaksiulotteiset materiaalit käyvät hitaalla: faasikenttäkide-malleista apua mikrorakenteiden hitaan kehityksen mallintamiseen

Väitöskirjan nimi	Phase field crystal modeling of two-dimensional materials Kaksiulotteisten materiaalien faasikenttäkide-mallintaminen
Väitöskirjan sisältö	<p>Faasikenttäkide-mallit (eng. phase field crystal, PFC) soveltuvat erinomaisesti kaksiulotteisten (eng. two-dimensional, 2D) eli yksittäisen atomikerroksen paksuisten materiaalien mallintamiseen. Tässä väitöskirjassa osoitetaan, että yksinkertaiset PFC-mallit kuvaavat mikroskooppisia rakenteita todenmukaisesti ja voivat jopa ennustaa niiden muodostumiseen vaadittavan energian hyvin. Näytimme myös, että PFC-malleilla voidaan tuottaa laadukkaita alkutiloja muille mallinnusmenetelmille, joilla tutkitaan lämmön siirtymistä ja muita ilmiöitä, joita PFC ei kuvaa. Kehitimme lisäksi lukuisia analyysi- ja muita apumenetelmiä tutkimuksen tueksi, mm. algoritmi kideorientaation tunnistamiseksi monikiteisissä systeemeissä ja edelleen näiden osioimiseksi erillisiksi kiteiksi. Tämä on ensimmäinen kaltaisensa menetelmä, joka soveltuu tavallisten kiteisten rakenteiden lisäksi myös jaksottomille kvasikiteille.</p> <p>Tässä väitöskirjassa tutkittiin laskennallisesti 2D-materiaaleja PFC-malleja soveltaen. Virheettömillä 2D-materiaaleilla on erinomaisia ominaisuuksia, mm. suuri lujuus suhteessa niiden paksuuteen sekä hyvä sähkön- ja lämmönjohtavuus. Atomikerroksen paksuisten virheettömien rakenteiden valmistaminen on kuitenkin osoittautunut haastavaksi ja lopputuote onkin tyypillisesti monikiteinen tilkkutäkki, jossa on useita raerajojen erottamia kiteitä. Raerajat ovat viivamaisia kidevirheitä ja voivat mm. heikentää materiaalin lujuutta ja sen johtavuutta. Kidevirheiden muodostuminen ja niiden vaikutus materiaaliominaisuuksiin tunnetaan vajavaisesti johtuen ongelmaan liittyvistä lukuisista pituus- ja aikaskaaloista. Lupaava lähestymistapa ongelmaan ovat hiljattain kehitetyt PFC-mallit, jotka kuvaavat kiteisiä materiaaleja tarvittavilla pituus- ja etenkin aikaskaaloilla.</p>
Väitöskirjan ala	Teknillinen fysiikka, kaksiulotteisten materiaalien mallintaminen
Väittelijä	Petri Hirvonen, DI
Väitöksen ajankohta	28.06.2019 klo 12
Paikka	Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulun sali M1, Otakaari 1, Espoo
Vastaväittäjä	Dr. Ben Goddard, The University of Edinburgh, UK
Kustos	professori Tapio Ala-Nissilä, Aalto-yliopiston perustieteiden korkeakoulu, teknillisen fysiikan laitos
Väittelijän yhteystiedot	Petri Hirvonen, teknillisen fysiikan laitos, 0505969368, petri.hirvonen@aalto.fi