

Väitöstiedote

Väitös 23.05.2024

A-paikan mukaan järjestäytyneiden kaksoisperovskiittien rakenne esimerkkinä $\text{CaMnTi}_2\text{O}_6$

Väitöskirjan nimi	Structural Principles of A-site ordered double perovskites: ferroelectric $\text{CaMnTi}_2\text{O}_6$ as a model system
Väitöskirjan sisältö	<p>Perovskiittioksidikeraamit ovat yksiä monipuolisimmistakiteisistä materiaaleista. Niitä on tutkittu paljon ja silti niissä on vielä paljon tutkittavaksi. Perovskiittien säädeltävyys tekee niistä suotuisia materiaaliikohtaiselle hienosäädölle, jolloin tiettyjä ominaisuuksia voidaan optimoida. Kiinnostavimpia ominaisuuksia perovskiitti-materiaaleilla ovat ferromagneettisuus, pietso-, ferro- ja pyrosähköisyys, moniferroisuus, sähkönjohtavuus, suprajohtavuus ja lämpöön ja optisiin ominaisuuksiin liittyvät piirteet.</p> <p>Kiteisten materiaalien kiderakenteen muokkaus ja analysointi kokeellisesti on merkittävä osa kiinteiden epäorgaanisten aineiden kemian ja materiaalitieteitä. Laskennallisia menetelmiä puolestaan voidaan käyttää ennustamaan kiderakenteita ennen synteesiä ja auttamaan syntetisoitujen materiaalien tulosten analysoinnissa. Laskennallisten ja kokeellisten menetelmien yhdistäminen on yhä yleisempää ja se parantaa tutkimuksen tieteellistä arvoa.</p> <p>Väitöskirjassa lähestytään A-paikan mukaan järjestäytyneitä kaksoisperovskiitteja, niiden muodostumista ja rakenteen ennustamista laskennallisesti. Lisäksi yhdisteen $\text{Ca}_{2-x}\text{Mn}_x\text{Ti}_2\text{O}_6$ rakennetta on tutkittu kokeellisesti ja muutosta x:n määrässä, sillä yhdsite voisi olla vaihtoehto nykyisille lyijyä sisältäville haitallisille ferrosähköisille yhdisteille.</p>
Väitöskirjan ala	Epäorgaaninen materiaalikemia
Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot	M.Sc. (Tech.) Elisabeth Albrecht ekalbrecht@outlook.com
Väitöksen ajankohta	23.5.2023 klo 12
Etäväitöksen osoite	https://aalto.zoom.us/j/63910435542
Paikka	Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, Komppa-sali, Kemistintie 1, (sisäänkäynti Biologinkujan puolelta pääovesta), Espoo
Vastaväittäjä(t)	Emeritus professori Markku Leskelä, Helsingin yliopisto
Valvoja	Professori Antti Karttunen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
Väitöskirjan verkko-osoite	https://aaltodoc.aalto.fi/handle/123456789/51
Avainsanat	A-paikan mukaan järjestäytyneet kaksoisperovskiitit, laskennallinen kemia, perovskiittirakenne, korkeapainesynteesi, yksittäiskiteet, ferrosähköisyys