

DOKTORAND: Tarjei Bondevik
GRAD: Philosophiae doctor
FAKULTET: Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet
INSTITUTT: Fysisk institutt
FAGOMRÅDE: Materialfysikk
VEILEDERE: Truls Norby, Øystein Prytz, Ole Martin Løvvik
DISPUTASDATO: 11. oktober, 2019

AVHANDLINGENS TITTEL: *Grain boundaries in a BaZrO₃-based proton conductor – A theoretical and experimental study on atomic scale*

Det keramiske materialet BaZrO₃ kan brukes til langtidslagre elektrisk energi i hydrogengass, men mye energi går tapt i prosessen. Energitalpet skjer på grunn av ugunstig organisering av atomer – vi undersøker dette med eksperimentelle og teoretiske tilnærminger.

En stor ulempe med fornybar energi er at produksjonen avhenger av været og ikke markedsetterspørsel. I en verden med bare sol- og vindenergi, vil vi ha lengre perioder med både for lav og for høy produksjon av energi, sammenlignet med etterspørsel. Derfor trenger vi en effektiv måte å lagre energien på, slik at vi alltid har tilgang til fornybar energi.

En måte å lagre energi på er å bruke elektrisk energi til å spalte vann om til hydrogengass. Denne energien kan lagres så lenge man vil, som kjemisk energi. Når man trenger energien, forbrenner man hydrogenet, og ender opp med vann som eneste utslipp. Dette er altså en svært attraktiv idé. Det store problemet er imidlertid at man taper svært mye energi på lagringsprosessen. I denne avhandlingen prøver vi å forstå hvorfor all denne energien går tapt.

Når man bruker det keramiske materialet BaZrO₃ til å omdanne vann til hydrogengass, må man sende strøm gjennom materialet. For at dette skal skje så effektivt som mulig, trenger vi at materialet har god *elektrisk ledningsevne*. BaZrO₃ har god ledningsevne – stort sett overalt – og er dermed et lovende materiale for å omdanne vann til hydrogengass. Men i små områder på bare noen få nanometer, er den elektriske ledningsevnen 100-100 000 ganger dårligere enn ellers i materialet. Vi vet dette er relatert til hvordan atomene organiserer seg, men vår fundamentale forståelse av dette er fortsatt mangelfull.

Det er svært vanskelig å gjøre eksperimenter med noe som er så lite. Derfor bruker vi mye simuleringer i denne avhandlingen, der vi regner ut organiseringen av atomer ved hjelp av superdatamaskiner. Vi finner at teori brukt til å forklare dette energitapet ikke stemmer dersom man bygger opp modeller fra nanoskalaen til den makroskopiske verden. Vi forsøker å lansere modifiserte teorier, men oppnår bare små forbedringer. Altså er det et betydelig arbeid som må gjøres i fremtiden for å gi oss en grunnleggende forståelse av dette.