

Masteroppgaver H2019

Li- og Na-ionebatterier; elektrodemateriale, mekanismer og stabilitet (Fjellvåg, Vajeeston, m.fl.)

Vi tilbyr inntil tre masteroppgaver knyttet til vår aktivitet på (bulk) Li- og Na-ionebatterier. Oppgavene vil dels veiledes av PhD og postdoc/forskere – totalt sett arbeider 10 Phd/pdocs innen vår batterilab på dette området. Vårt fokus er å forstå hvorledes redoks-prosesser finner sted i katode og anodematerialer, og spesielt på hvordan man kan utvikle materialer med høyere energikapasitet som samtidig viser god evne til reversibilitet og dermed opp/utladningssyklus. Utover å ha fokus på mekanismer under opp/utladning, studerer vi aspekter knyttet til sikkerhet – hva skjer når et batterimateriale utsettes for ekstreme betingelser? Knyttet til dette, har vi fokus på fast stoff elektrolytter, som kan erstatte dagens væske-elektrolytter, og bidra til økt stabilitet, lengre levetid, mindre tap. Vi tilbyr ulike typer masteroppgaver; med fokus på syntese av nye materialer og elektrokjemisk karakterisering av disse. Vi ønsker å forstå mekanismer under opp/utladning og benytter en kombinasjon av elektrokjemiske studier og operando studier (studerer batterimaterialer tidsoppløst under syklingbetingelser) gjennom synkrotronbasert diffraksjon og spektroskopi. Vi har fokus på å forstå og forutsi egenskaper for modifiserte/nye forbindelser basert på DFT modellering, gjerne supplert av syntese og verifikasjon gjennom karakteriseringsstudier. Som masterstudent vil du vekselvirke med de sentrale norske fag og brukermiljøer innen batteriteknologi gjennom FME-senteret MoZees, og ta del i diskusjoner rundt elektrifisering og energilagring – i et perspektiv av fornybar energi. Ta kontakt for diskusjon av konkrete oppgaver.

Nye multianionforbindelser – fundamentale studier og anvendelser (Fjellvåg, Sjøstad, Valldor mfl.)

Oksider er en stor og viktig stoffklasse. Mange avanserte materialer med stor teknologisk betydning er oksider. Dette omfatter ulike fysiske egenskaper, slik som magnetisme (ferro/antiferro osv), ferroelektrisitet (piezo-/pyro osv), elektrisk ledningsevne (halvleder, metall, superleder; TCOer osv), optiske egenskaper, (foto)katalytiske egenskaper og mer. Vi tilbyr masteroppgaver innen nye forbindelser basert på to eller flere anioner; dvs som samtidig inneholder to eller flere anioner av typene oksid, nitrid, hydrid, fluorid, klorid, eller sulfid. Slike har inntil nå blitt studert i relativt liten grad. Det interessante med slike forbindelser er at struktur og fysiske egenskaper (som til syvende og sist er knyttet til elektroniske egenskaper og dermed atom-arrangement) vil kunne være signifikant annerledes enn for enkle oksider. Dette vil kunne gi opphav til mange spennende egenskaper. Multianionforbindelser har potensial for å gi oss ny innsikt og nye viktige materialer. Ulike masteroppgaver er mulig; hovedvekt kan være syntese (kjemiske synteseveier, vekst av enkeltkrystaller, bruk av høytrykksmetoder, mm); strukturbestemmelse (røntgen, nøytron, elektron – i Norge og internasjonalt); DFT beregninger for å beskrive/predikere eksistens av forbindelser, deres struktur og elektroniske egenskaper. Som masterstudent vil du få veiledning av flere vitenskapelig ansatte i gruppa, inklusive våre forskere. Du vil kunne lære deg bruk av avanserte syntesemetoder og karakteriseringsteknikker (strukturbestemmelser – variasjon med temperatur/trykk; magnetisk/elektrisk karakterisering/varmekapasitet/) samt beregningsmetoder, og du vil vekselvirke med studenter som jobber innen syntese, karakterisering, modellering. Du vil kunne gjøre eksperimenter hos samarbeidspartnere i Grenoble, Oxford, Bangalore, mm. Ta kontakt for diskusjon av konkrete oppgaver.

Funksjonelle oksider; tynnfilm, bulk, struktur, egenskaper, simuleringer (Fjellvåg, Sønsteby, Vajeeston, m.fl.)

På dette klassiske oksidfeltet ønsker vi å trekke veksler på nye muligheter innen syntese, kombinert med egenskap/struktur studier og DFT simuleringer. Fokus settes da på et system der man vet at det er rom for svært spennende resultater knyttet til struktur-egenskapssammenhenger, men at dette forutsetter fremstilling av prøver utover hva som har vært mulig tidligere.

Vi tilbyr 1-2 masteroppgaver innen feltet. Fokus vil være (i) sammenlignende studier av prøver (materialer) laget som tynnfilm (ALD) og laget som bulkprøver (høytrykkssynteser, SPS, kontrollert kjemisk reduksjon); (ii) DFT beregninger av elektronstruktur; (iii) bestemmelse av krystallstruktur og måling av fysikalske egenskaper. Spesielt ønsker vi å studere forbindelser som viser metall – isolatorer overganger, og systemer som potensielt vil kunne bli superledende ved visse betingelser gjennom styring av elektroniske forhold (elektron/hull-doping). Som masterstudent vil du jobbe sammen med studenter og forskere med flere ulike spesialiteter. Din oppgave er å lage materialer, gjøre eksperimenter og beregninger slik at du samlet sett kan gi en solid beskrivelse av struktur - egenskapsrelasjoner. Det er mulig å velge hovedfokus på et av temaene (i), (ii) og (iii). Du vil kunne gjøre eksperimenter hos våre samarbeidspartnere i Grenoble, Oxford, Bangalore, mm. Ta kontakt for diskusjon av konkrete oppgaver.

Material/katalyse/reaktivitetstudier innen nitrogenkjemi og kunstgjødselteknologi (Sjåstad, Fjellvåg m.fl.)

Dette er et fagområde vi har et tett samarbeid med Yara International og K. A. Rasmussen, og mye av aktiviteten er støttet gjennom «iCSI», som er et senter for forskningsdrevet innovasjon. Helt konkret jobber vi med katalysatorer og edelmetallinnsamlingsenheter (eller nett) som brukes i Oswald-prosessen (oksidasjon av ammoniakk til NO), som er et av trinnene i fremstilling av kunstgjødsel. I denne prosessen oksideres ammoniakk ved høy temperatur til NO-gass over en PtRh katalysator. En uheldig sideeffekt er at Pt- og Rh metall damper av katalysatoren i form av oksider. Edelmetall er kostbare, og avdampet Pt og Rh (i form av oksider) må derfor renses ut av prosessstrømmen for resirkulering. Dette kan gjøres med såkalte «catchment-nett», som er plassert rett under katalysatornettet i fabrikken. Kommersielle catchment-nett er i dag laget av en Pd-Ni legering.

For tiden jobber vi med å forstå hvordan PtO₂ reagerer med Pd-Ni nettet og omdannes til Pt metall, samt at vi studerer alternative materialer (andre legeringer og oksidmaterialer) som kan brukes for formålet. I tillegg trenger vi å forstå bedre hvordan vi skal kunne fange inn RhO₂ på en likedan måte. Vi gjør laboratorieeksperimenter her på Kjemisk Institutt, der vi etterlikner prosessen i liten skala. I tillegg gjør vi noen forsøk i pilotfabrikken til Yara på Herøya. Sentrale oppgaver i arbeidet er å i) lage og karakterisere materialer som kan brukes for edelmetallfangst, ii) undersøke hvor godt materialene fungerer for edelmetallfangst gjennom lab/pilotskala forsøk og evt. iii) studere diffusjon av Pt/Rh metall i utvalgte innfangningsmaterialer.

Avhengig av interesser og hvordan oppgaven defineres vil du kunne spesialisere deg på i) syntese (kompleksering- og eller keram metode) og karakterisering av oksider (røntgendiffraksjon, SEM, optisk mikroskopi, termisk analyse) og evt. konvertere disse til en form som egner seg for studere hvor godt de fanger inn Pt og eller Rh (for eksempel belegg); ii) utføre reaktorstudier i 5/6 soners ovner i labben og i pilotreakstoren hos Yara med tilhørende karakterisering av materialene før og etter eksponering (røntgendiffraksjon, SEM, termisk analyse, grunnstoffsanalyse mm); iii) diffusjonsstudier på modellprøver (prøvetillaging – deponeringsprosesser med varmebehandling;

romopløst kjemisk analyse (SIMS og/eller XPS med sputtering); modellering av konsentrasjonsprofiler).

Nanopartikler for katalysatorfremstilling og antibakteriell effekt (Sjåstad, Vajeeston, Fjellvåg m. fl.)

I denne aktiviteten er primærfokus satt på syntese og karakterisering av veldefinerte nanopartikler. Nanopartiklene skal fortrinnsvis være monodispersible, ha en veldefinert morfologi og kjemisk sammensetning. Vi oppnår korrekt partikkelkarakteristikk ved å trigge homogen nukleering etterfulgt av en vekstfase i løsning. Typiske karakteriseringsteknikker for å beskrive nanopartiklene er røntgendiffraksjon, SEM og TEM. Med hensyn til applikasjon nyttiggjøres partiklene i katalysatorfremstilling med påfølgende katalytisk testing for ulike nitrogenbaserte reaksjoner eller for å studere antibakteriell effekt. Partikler fremstilt gjennom kolloidal syntese brukes også for operando TEM eksperimenter. Disse studiene gjøres i samarbeid med Yara International og Universitetet i Cape Town. Videre har vi startet opp en mindre aktivitet der vi gjør teoretiske beregninger (DFT/MD-teori) for å få innsikt i nanopartiklenes termodynamiske stabilitet.

Dette semesteret kan vi tilby et MSc prosjekt på tema, og det vil være ønskelig å kunne kombinere partikkelsyntesen med operando TEM og/eller teoretiske beregninger.

Forslag til masteroppgaver ved Tynnfilm-NAFUMA

Fast stoff elektrolytter med ALD (Veiledere: Ola Nilsen, Kristian Kvamme, Katja Sverdlilje)

Neste generasjons litiumbatterier vil være basert på fast stoff elektrolytter, men det finnes ikke noen fast stoff elektrolytt i dag som har overlegne egenskaper. Denne masteroppgaven vil bli del av pågående prosjekter med å utvikle fast stoff elektrolytter med tynnfilmteknikken ALD. Vi har i dag fokus på fremstilling av elektrolytter basert på fosfater og elektrolytter basert på organisk-uorganiske hybridmaterialer. Vi har behov for hjelp til utvikling av begge typer materialer, men hovedvekt i masteroppgaven vil være på en av disse klassene materialer. Arbeidet i masteroppgaven vil inkludere kartlegging av vekst av tynne filmer av slike elektrolytter med ALD (vekstrate som funksjon av temperatur og kjemi, in situ QCM analyse), fysikalsk karakterisering av overflater og av filmene som deponeres (spektroskopisk ellipsometri, XRD, XRR, XRF, og mer), integrering av fast stoff elektrolytt i halvceller og karakterisering av elektrokjemiske egenskaper til slike celler med og uten fast stoff elektrolytt (galvanostatikk, syklisk voltametri, og mer), karakterisering av ionisk ledningsevne til elektrolytten (elektrokjemisk impedans spektroskopi). Avhengig av fokus og evner så vil du som student naturlig dykke dypere ned en eller to av teknikkene, men samtidig være bruker av alle. Du vil inngå som en del av et faglig fokus som dekker over mange pågående prosjekter (10+ personer).

Porøse tynne filmer med ALD (Veiledere: Ola Nilsen, Per-Anders Hansen)

Vi har lang erfaring med fremstilling av organisk- uorganiske hybridmaterialer som tynne filmer. De aller fleste av disse har hatt amorf struktur og ikke vært spesielt porøse. I de siste årene har vi også klart å fremstille krystallinske porøse filmer av slike hybridmaterialer. Ett eksempel på dette er UiO-66 klassen med materialer fremstilt med ALD. Vi ønsker å fortsette arbeidet med fremstilling av hybridmaterialer ved å ha fokus på den porøse strukturen til slike filmer. Det er stor etterspørsel etter slike filmer til bruk innen separasjonsteknikker, sensorer, diagnostikk, dielektrisk materiale til elektronikk, optiske komponenter, og mye mer. Fokus vil være på fremstilling av filmer med karakterisering av vekst (vekstrate som funksjon av temperatur og kjemi, in situ QCM analyse), fysisk karakterisering av overflater og av filmene som deponeres (spektroskopisk ellipsometri, ellipsometrisk porosimetri, XRD, XRR, og mer). Basert på hvordan filmene oppfører seg vil vi forsøke integrering av materialene som sensorer (Philipp Häflicher/IFI), som kromatografi materialer (Steven Wilson/KI), som bioaktivt materiale (Håkon Rukke/NIOM), som optisk materiale (internt/KI) og mer. Avhengig av fokus og evner så vil du som student naturlig dykke dypere ned en eller to av teknikkene, og her vil ellipsometrisk porosimetri være en naturlig unik teknikk for deg. Samtidig vil du være bruker av alle nevnte teknikker. Du vil inngå som en del av et faglig fokus som dekker over mange pågående prosjekter (10+ personer).

Oksidbaserte heterostrukturer med ALD (Veiledere: Henrik Sønsteby, Ola Nilsen ++)

Vi har ved NAFUMA over lang tid vist at ALD teknikken har er godt egnet til å deponere komplekse oksider. Her er vi i dag verdensledende og jobber systematisk med å vise kvaliteter i heterostrukturer opp mot MBE kvalitet. Vi ønsker å videreføre dette arbeidet med å fokusere på materialer i systemet $RE(Ni,Cu)O_3$ systemet hvor det finnes en lang rekke ulike elektroniske egenskaper. Arbeidet vil ha fokus på kartlegging av vekst og hvordan de ulike forløperne påvirker hverandre under deponering. Filmene vil bli deponert på enkrystallinske substrater for å fremme epitaksiell vekst. Slike strukturer vil bli karakterisert med XRD i hjemmelaboratorie, og også ved hjelp av synkrotronbaserte stråler ved ESRF eller andre strålelinjer, samt mulig TEM baserte studier ved UiO (Øystein Prytz/FI). Avhengig av fokus og evner så vil du som student naturlig dykke dypere ned en eller to av teknikkene, og her vil røntgenbasert strukturanalyse være en naturlig teknikk for deg. Samtidig vil du være bruker av alle nevnte teknikker. Du vil inngå som en del av et faglig fokus som dekker over mange pågående prosjekter (6+ personer).