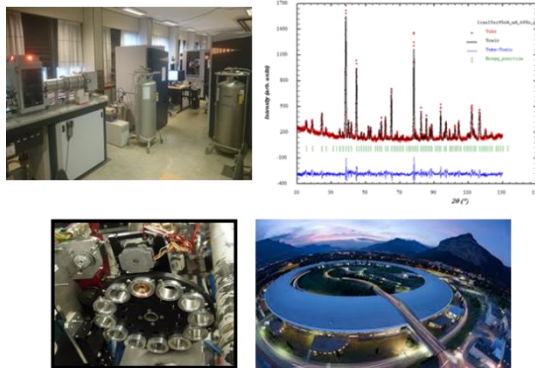


Masteroppgave – NAFUMA – uorganisk materialkjemi

Helmer Fjellvåg; medveiledere fra andre i staben, post doktorer og stipendiater

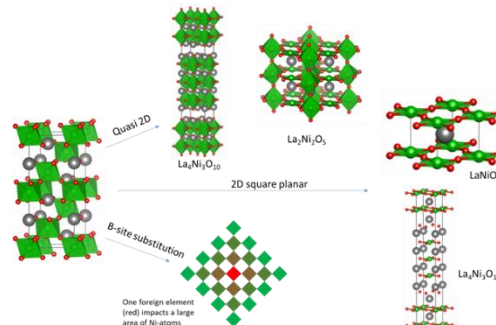
Jeg ønsker å tilby oppgaver innen noen utvalgte temaer blant de mange feltene som jeg tidligere har arbeidet med, og som nå på utmerket vis dekkes nå solide kollegaer i NAFUMA.

Et tema er struktur – egenskapssammenhenger for funksjonelle oksider og fluorider. Med egenskaper tenkes her på elektroniske/elektriske egenskaper, magnetiske og optiske egenskaper. Slike forbindelser må først syntetiseres. Dette gjøres som regel ved våtkjemiske metoder, dels under inert beskyttelses-atmosfære, eller kontrollerte partialtrykk. Deretter studeres termisk stabilitet og reaktivitet i luft, slik at man vet nøyte hvordan slike prøver må håndteres i tilfellet de er luftømfindelige. Siden et hovedmål er å forstå hvordan fysikalske egenskaper henger sammen med krystallstruktur og kjemisk binding, er det nødvendig å bestemme atomarrangementet i detalj. Det gjelder både det gjennomsnittlig, slik man studerer med diffraksjonsmetoder, og det lokale slik man kan studere med IR/RAMAN, NMR eller XAS metoder ved et synkrotronanlegg. I noen tilfeller benyttes nøytroner. Noe relevante bilder er



vist til venstre. Dette gjelder når man trenger kontrast mellom visse atomslag, eller skal studere magnetisme. Når man så kjenner atomarrangementet i detalj, og gjerne også eventuelt temperaturinduserte endringer, så gjøres målinger av fysikalske egenskaper. Den klare sammenhengen mellom struktur, kjemisk binding, fysikalske egenskaper egner seg godt til nøyere studier i teoretiske modelleringer med DFT. Hvis man ønsker kan altså en eksperimentell oppgave ha en teoretisk

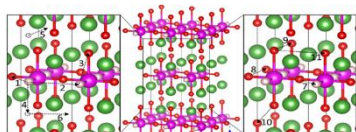
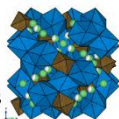
komponent, og vice versa. De forbindelsene som ønskes studert er såkalt «nye». Det vil si, de er ikke tidligere fremstilt, og dermed heller ikke studert. Disse vil være enten fluorider (evt blandede anionforbindelser med F som et av anionene) eller oksider. Strukturene til forbindelsene vi studerer kan ha slektskap, slikt indikert med perovskitter og RP-faser til høyre, for nikkellater.



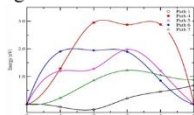
Mye innsikt i kjente og ikke-kjente forbindelser kan oppnås gjennom teoretisk modellering. Man kan søke etter helt nye forbindelser, lage kombinasjoner, beregne struktur for den mest stabile varianten, beregne egenskaper, og prøve deretter å lage forbindelsen med et mest mulig egnet syntesemetode. Det er aktuelt å gjøre slik søken etter nye

Solid state ionic transport - simulations

Activation energy calculation
2D and 3D materials
Candidates for solid electrolytes



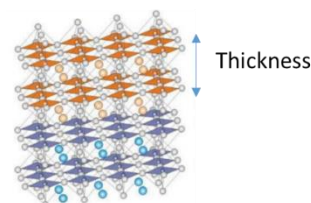
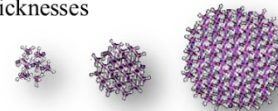
Find minimal energy path from
Nudged elastic bands calculation



dannelse av defekter og mobilitet til ioner, og finner veier med minimums energi. Et annet interessant tema, som enklest kan studeres i en regnemaskin fremfor på laben, er å studere hvordan struktur og egenskaper endrer seg som funksjon av størrelse for en nanopartikkel, og som funksjon av tykkelse (f.eks. 3 – 20 Å) for en 2D film på et substrat. Man kan tenke seg noen utvalgte eksperimenter for verifisering. Det er aktuelt å studere (i) to-komponent (bi-)metalliske nanopartikler, og perovskitt baserte tynne filmer. Disse kan være metalliske ledende, være deformert med ferroelektriske egenskaper, eller ha langt rekkende magnetisk orden. Mulighetene er mange. Dette er illustrert med noen nanopartikler over, med ulik størrelse, der overflate-terminering og arrangement vil kunne være størrelsesavhengig, og sterkt koblet til ytre miljø (absorberte species). Likeledes vises noen 2D lag av perovskitter i figuren, her to ulike typer, oransje og blått, med noen Ångström tykkelse.

forbindelser for klassen av «mixed anion compounds», en gruppe der det ennå er masse ukjent, og sikkert mye interessant. I mange sammenhenger er ione-transport i faste stoffer viktig. Det gjelder fast stoff elektrolytter som tenkes brukt i ione-batterier, det gjelder katodematerialer som skal kunne hurtiglades, det gjelder forbindelser som skal fungere som ioneledere i fast form. Også slike kan man søke etter systematisk gjennom bruk av egnede algoritmer, dels også med bistand fra maskinlæring. Vi beregner da aktiveringsenergi for

Structure at different length scales, particle sizes, film thicknesses



Disse oppgavene vil tilbys sammen med kollegaer ved NAFUMA som med-veiledere; Anja Olafsen Sjøstad, Martin Valldor, Henrik Sønsteby, Ponniah Vajeeston og andre