

Ár eðlisfræðinnar, 2005

Nanókerfi og Orka

Hannes Jónsson

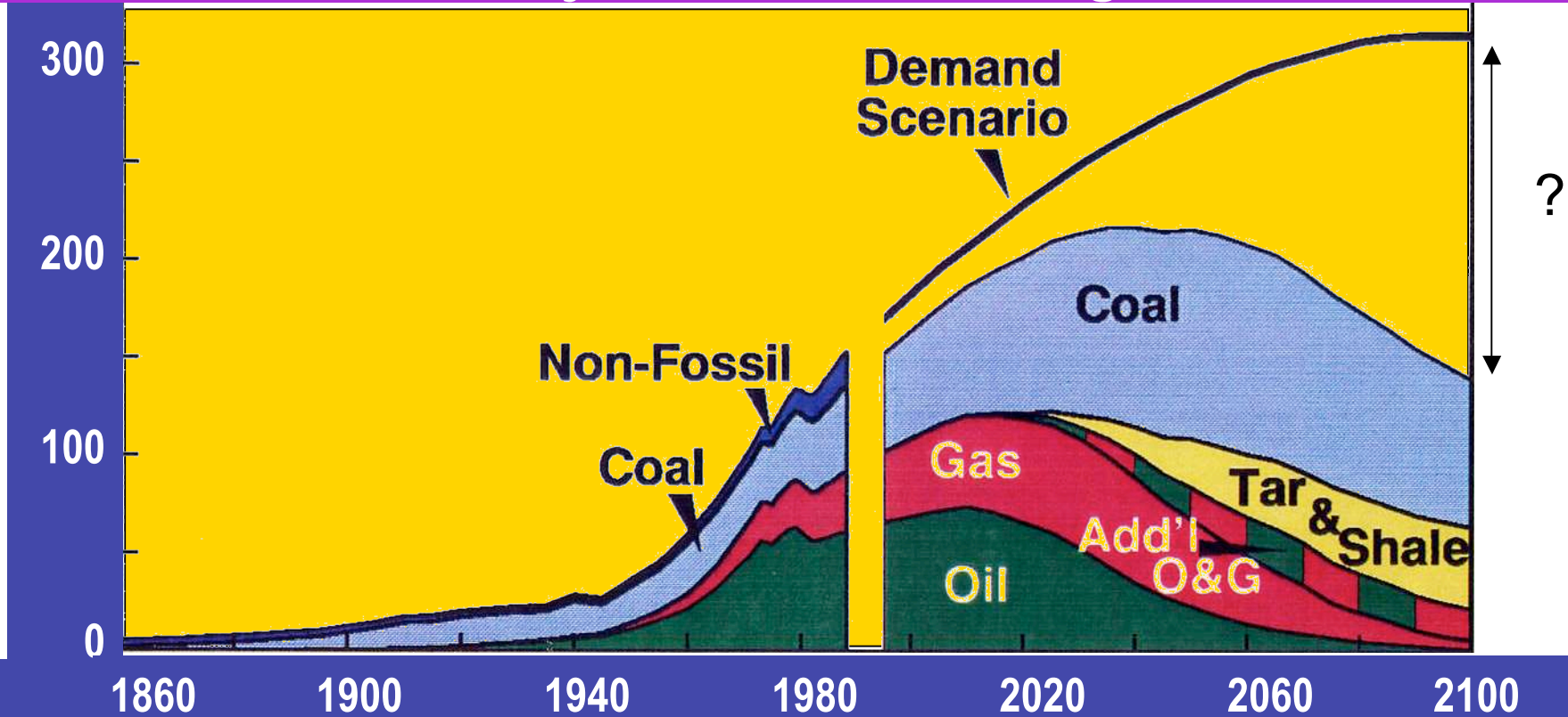
Efnafræðiskor, HÍ

www.hi.is/~hj



Orkunotkun á Jörðinni

Samsvarandi miljónum tunna á dag af olíu

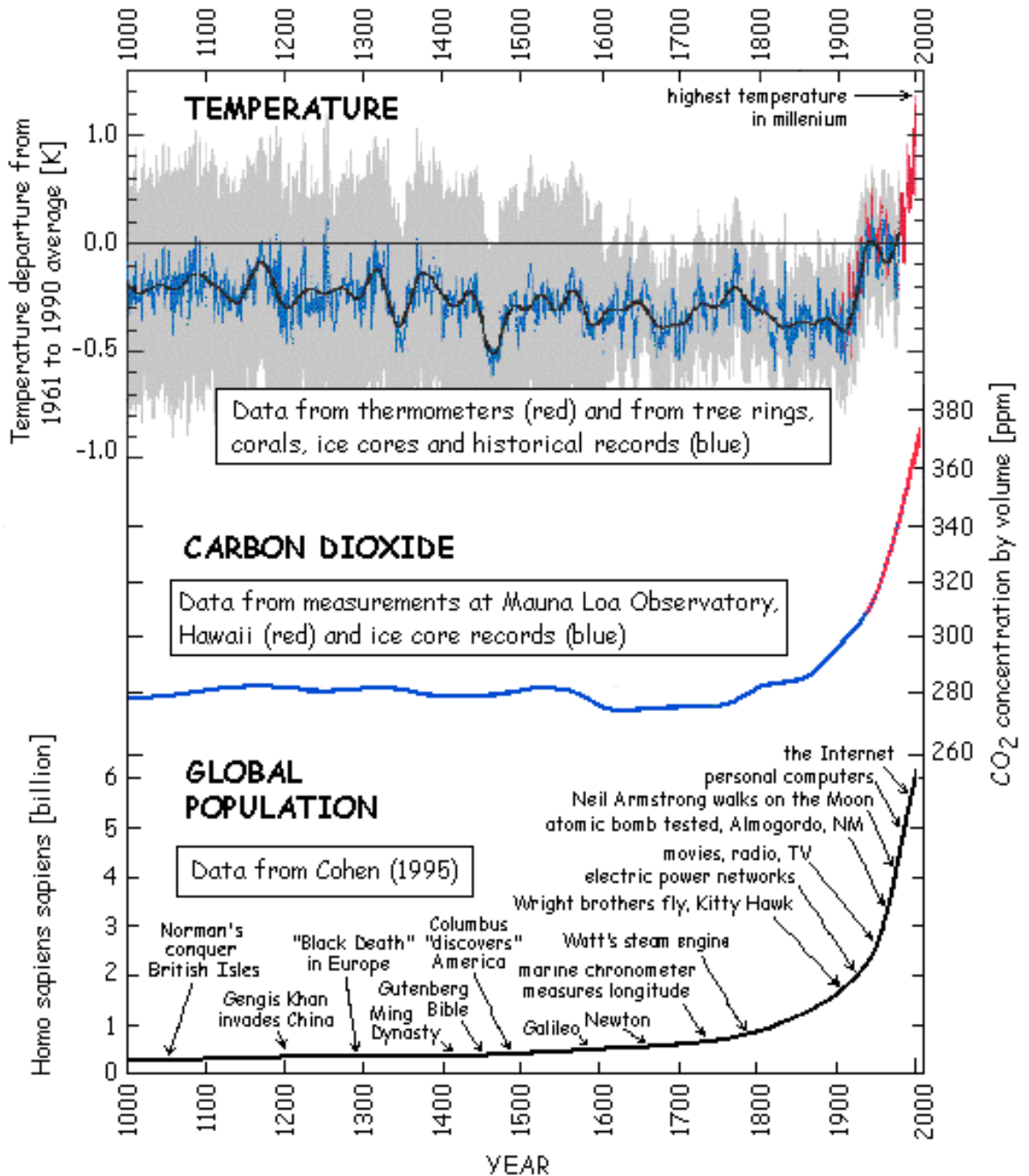


Source: John F. Bookout (President of Shell USA) ,“Two Centuries of Fossil Fuel Energy” International Geological Congress, Washington DC; July 10,1985. Episodes, vol 12, 257-262 (1989).

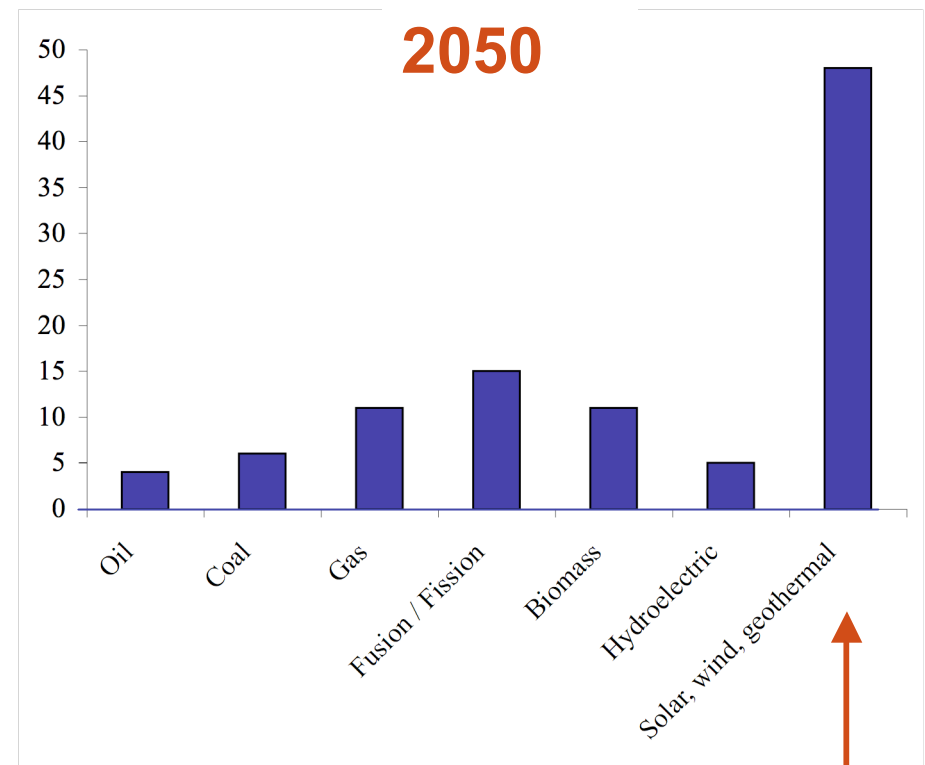
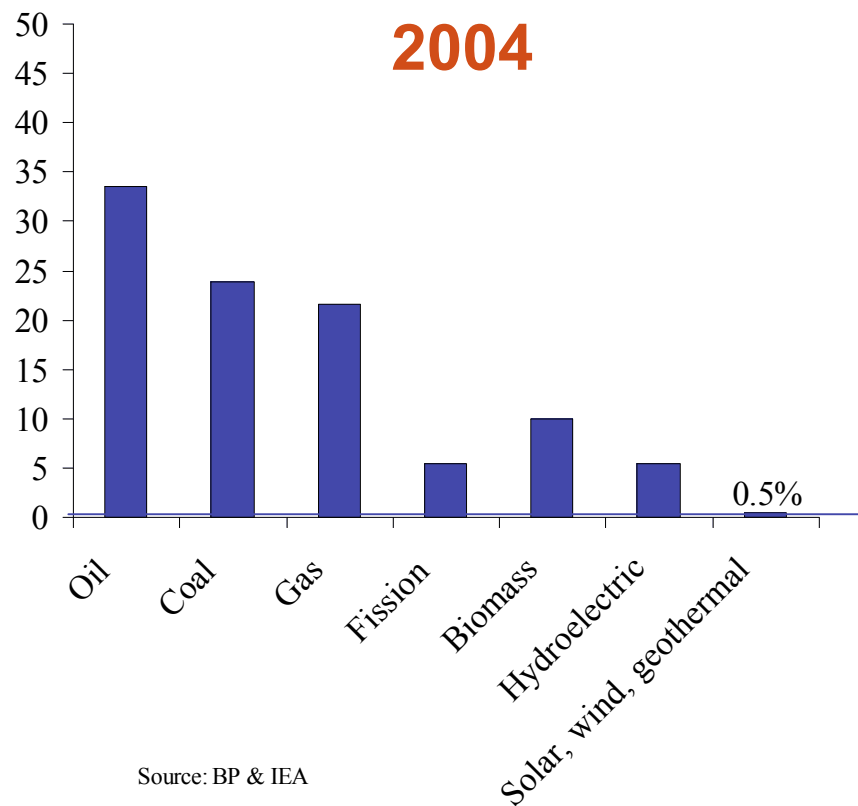
Gróðurhúsa- áhrifin

Verðum að
hætta að
brenna olíu,
gasi og
kolum sem
allra fyrst!

Frá Marty Hoffert,
NYU



Hvaðan mun orkan koma í framtíðinni?

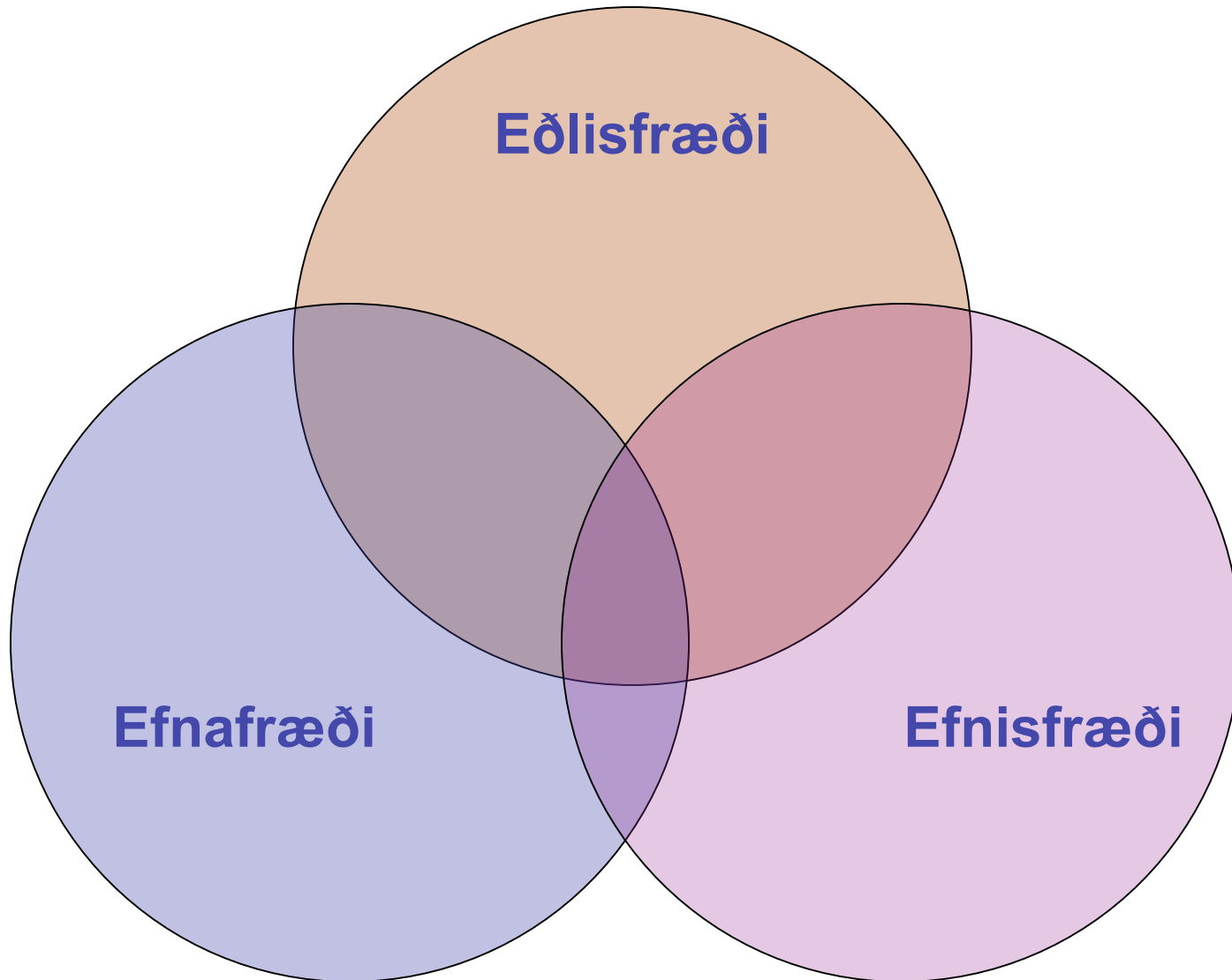


sólhlöður,
vindmyllur, jarðvarmi

Hvað vantar?

- Betri tækni og lægra verð á **endurnýjanlegri** orku (sólar, vind, jarðvarma, ...).
- Rannsóknir á grundvallareiginleikum efna og orkuflutningi.
- Ný efni.
- Framsýni stjórnvalda.
- Fleiri **vísindamenn** og **verkfræðinga** sem vinna að þessum málum!

Vísindasviðin skarast



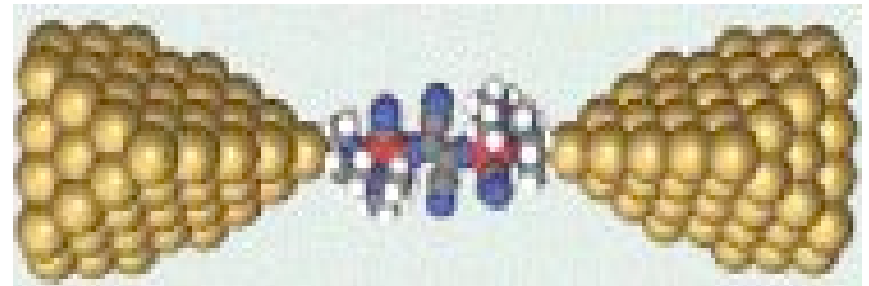
Nanótækni (örtækni)

Vísindagarðar HÍ í Vatnsmýrinni



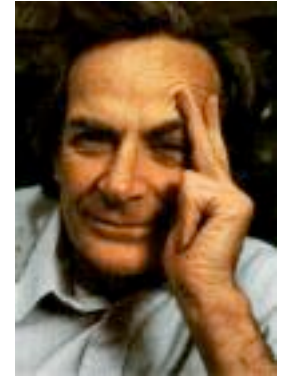
Hönnun á skalanum 1 m

Rafeindatækni með
sameindum



Hönnun á skalanum 1 nm
= 10^{-9} m

Richard P. Feynman (1918-1988)

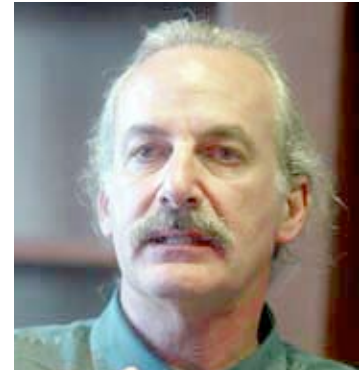


Erindi flutt á árlegum fundi Ameríska Eðlisfræðifélagsins **1959**

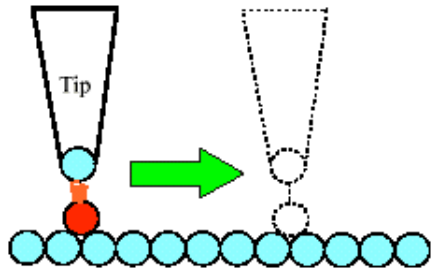
“There's Plenty of Room at the Bottom *An Invitation to Enter a New Field of Physics”*

- Því ekki að skrifa öll 24 bindi af Encyclopedia Britannica á nálarhaus?
- Þurfum bara að smækka letrið 25 þúsundfalt.
- Hver punktur myndi samt vera 30 atóm í þvermál (1000 atóm í punkti).
- Það gæti jafnvel verið einhver hagkvæmni í því að gera hlutina smáa.
- Hvaða efnaeiginleikum gætum við náð fram ef við gætum raðað atómunum upp eins og við viljum hafa þau?

Atóm flutt til með STM

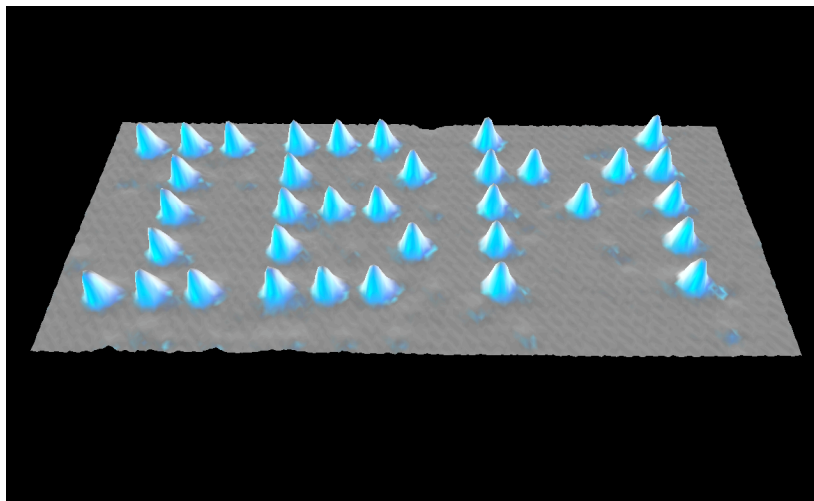


Don Eigler, IBM San Jose, CA

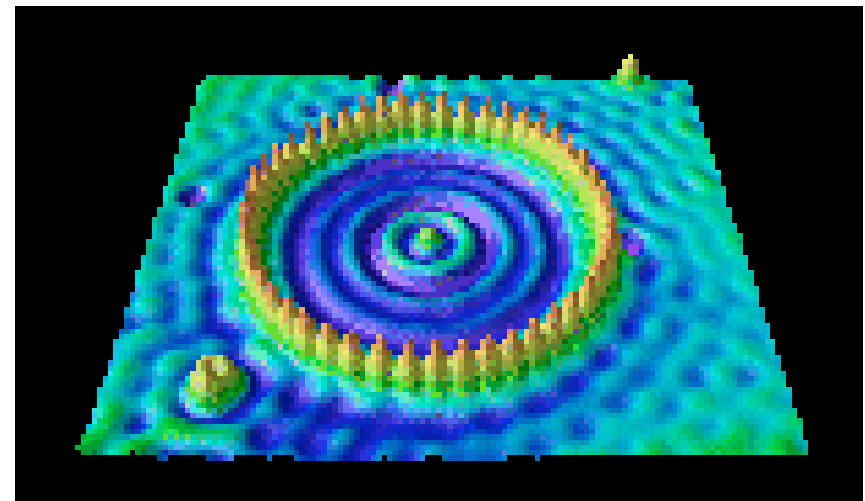


1990

1993



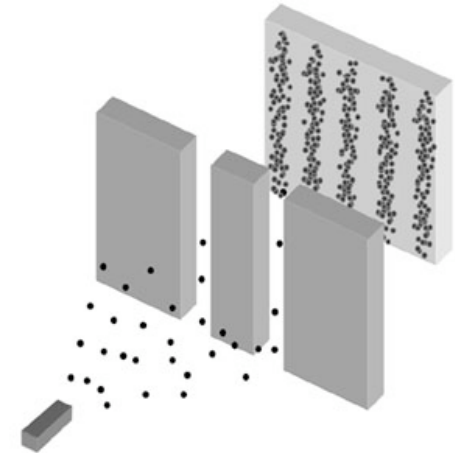
Xe atóm á yfirborði
nikkel kristals



Fe atóm á yfirborði
kopar kristals

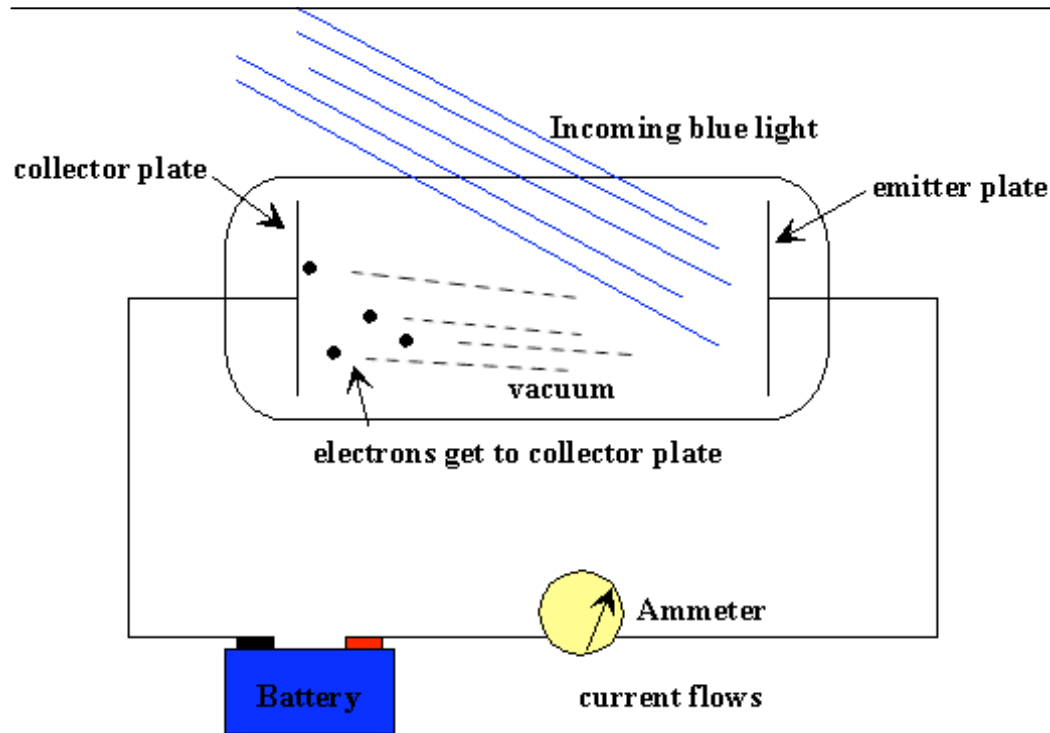
Aflfræði smárra agna - Skammtafræðin

- Agnir hafa bylgjueiginleika. Ef raf-eind hefur um tvær leiðir að velja getur komið fram **bylgjusamspil**.
- Agnir geta farið í gegnum svæði þar sem stöðuorkan er hærrí en heildarorka agnarinnar - **smug** (notað í STM).
- Orka agnar getur verið **skömmtuð**, ekki samfelld gildi.
- Rafsegulbylgjur (ljós) hafa agnaeiginleika
ljóseindir hafa orku $\epsilon = h \nu$

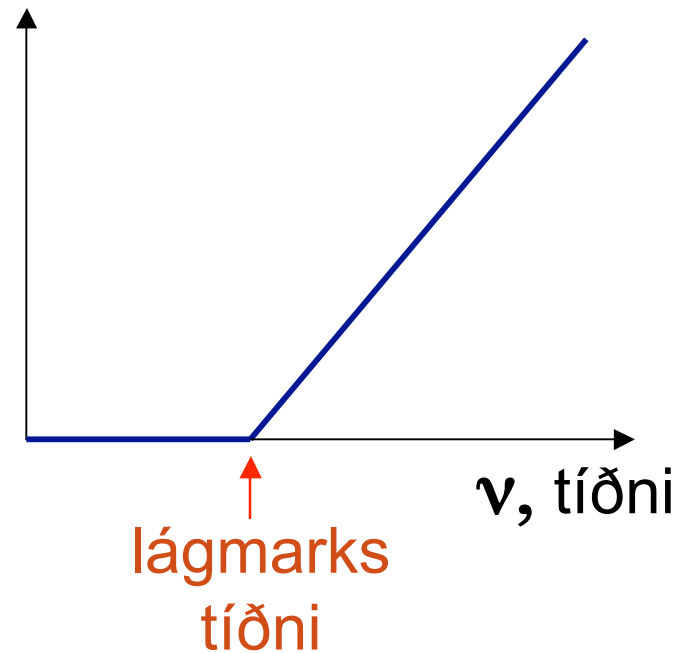


Feynman: “I think it is safe to say that no one understands Quantum Mechanics”

Tilraun sem gaf óvæntar niðurstöður



Hreyfiorka
rafeindanna



Þegar styrkur ljóssins var aukinn, og þar með orkuinnflæðið jókst hreyfiorka rafeindanna ekki heldur bara fjöldi þeirra. Hreyfiorkan jókst hins vegar við það að auka tíðni ljóssins eftir að ákveðnum þröskuldi (háð málminum) var náð.

Einstein, 1905



Í einni af þremur tímamótagreinum sem Einstein birti árið 1905 útskýrði hann **ljósrof** (photoelectric effect).

Mikilvægt skref í átt að þróun skammtafræðinnar.

Orkan í rafsegulbylgjum (og þar með ljósi) er skömmtuð

$$\varepsilon = h \nu$$

Víxlverkun ljóss við efni - **orkuflutningur frá ljósi í rafeind** - getur eingöngu orðið ef einn (eða fleiri), heill orkuskammtur fer úr rafsegulbylgjunni í efnið (rafeind).

Í ljósrofi fer hluti af orkunni í að vinna á móti bindiorku rafeindarinnar við málminn, W , en restin af orkuskammtinum kemur fram sem hreyfiorka rafeindarinnar eftir að hún losnar

$$\text{Hreyfiorka rafeindar} = h \nu - W$$

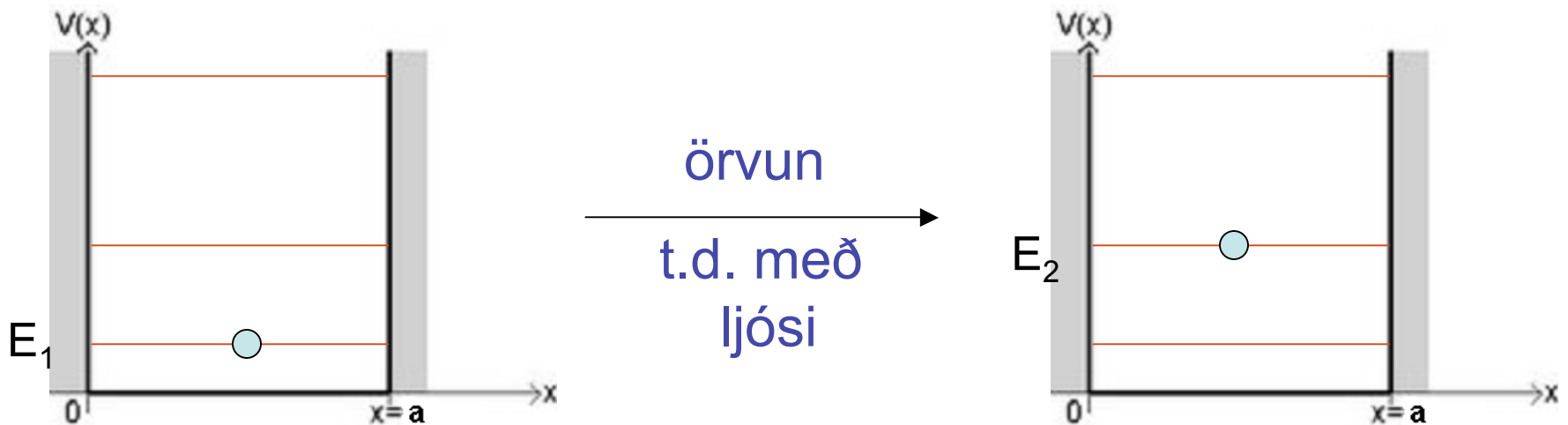
Orkan er varðveitt.

Fékk Nóbelsverðlaunin 1921.

Hvað ef rafeindin skýst ekki burt?

Orka rafeindar sem er bundin við **takmarkað svæði** er skömmtuð og getur aðeins aukist um **tiltekin gildi**.

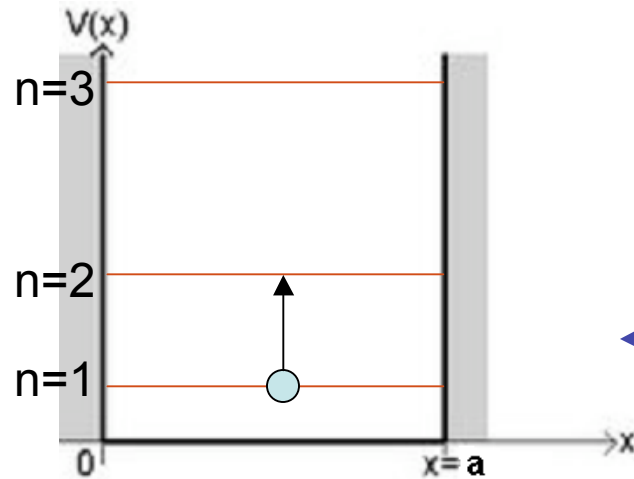
Einfaldasta dæmið: “Rafeind í kassa”



Til að rafsegulbylgja (þar með ljós) geti örvað rafeindina verður orka ljóseindarinnar að vera (u.þ.b.) jöfn mismuninum á tveimur leyfilegum orkugildum rafeindarinnar

$$h \nu = E_2 - E_1$$

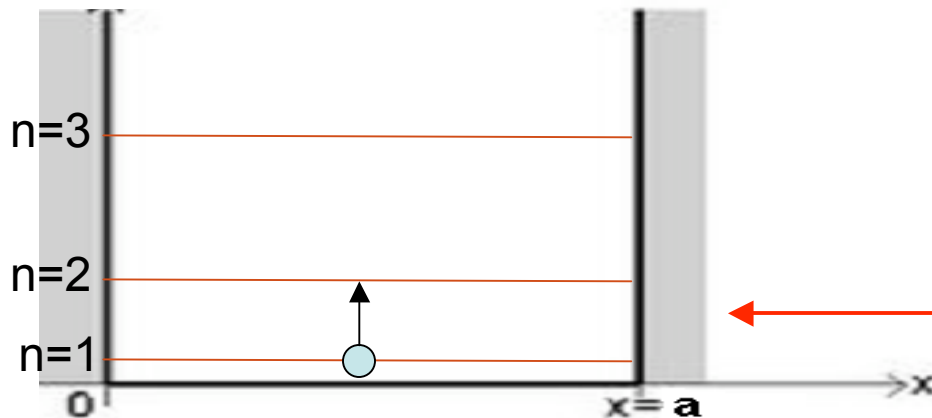
Tíðnin er háð stærð “kassans”



Orkuprep: $E_n = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}$

n er skammtatalan, $n=1,2,\dots$

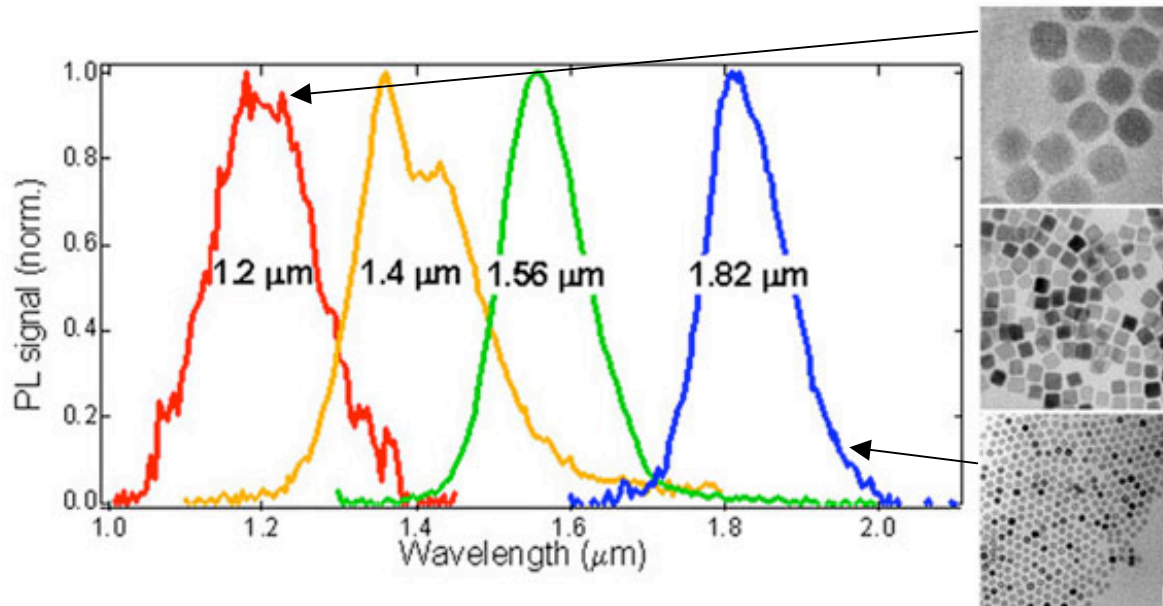
← T.d. gleypir blátt ljós



Ef kassinn er stærri, þá eru minni bil milli orkugildanna

← T.d. gleypir rautt ljós

Nanótækni gerir það kleift að
búa til efnisagnir sem gleypa ljós (eða
gefa frá sér ljós) af tiltekinni bylgjulengd



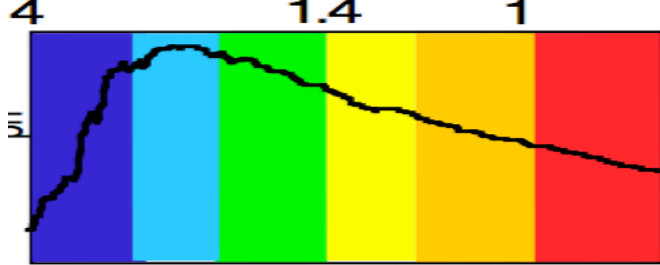
PbSe nanó-
kristallar af
mismunandi
stærðum,
TEM myndir.

Agnir sem þessar kallast “**skammtapunktur**”.
Þær eru smærri en bylgjulengdin.

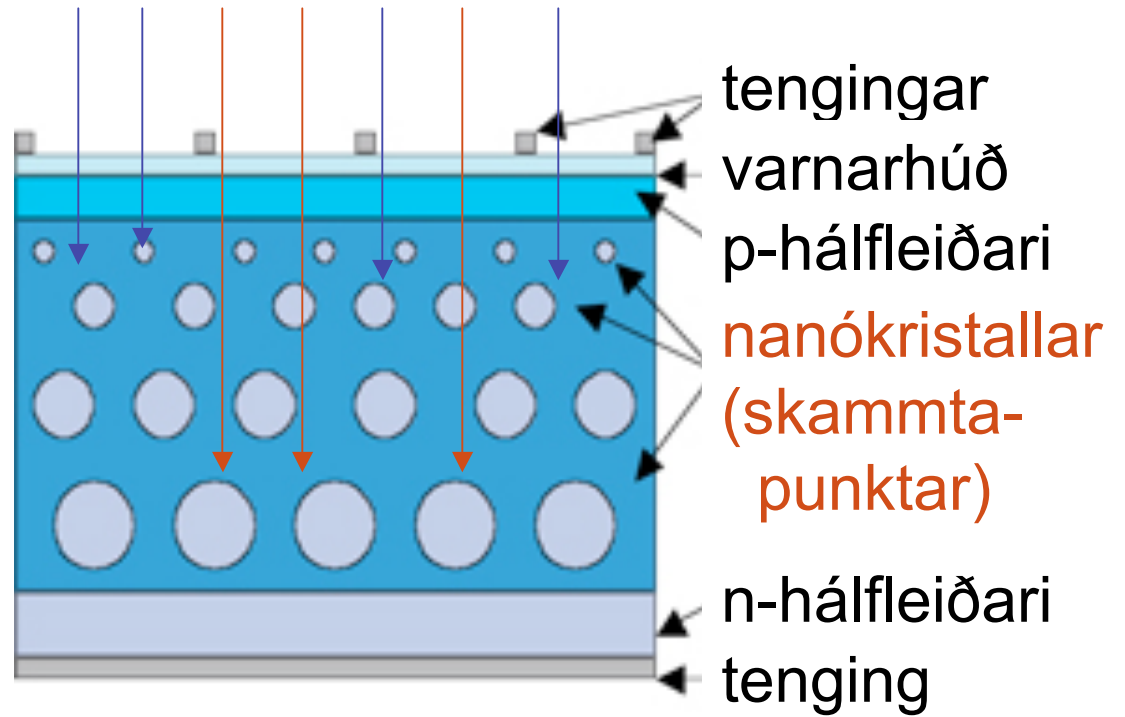
Hægt að þekja róf sólarljóssins með því að nota misstórar efnisagnir

Sólarljós

orka ljóseindar (eV)

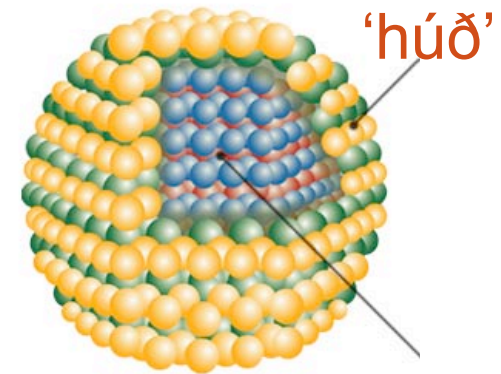
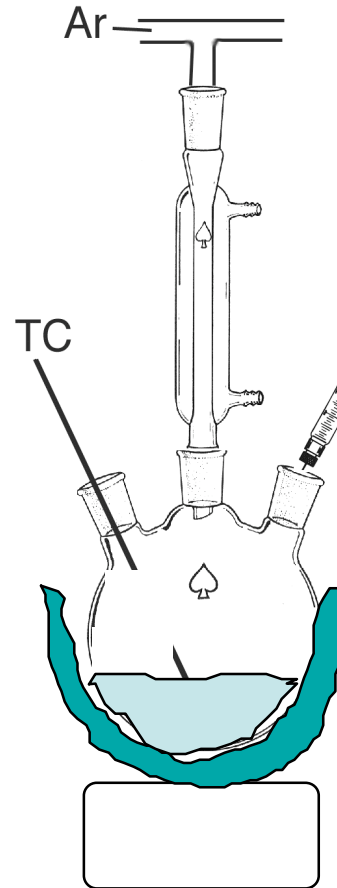
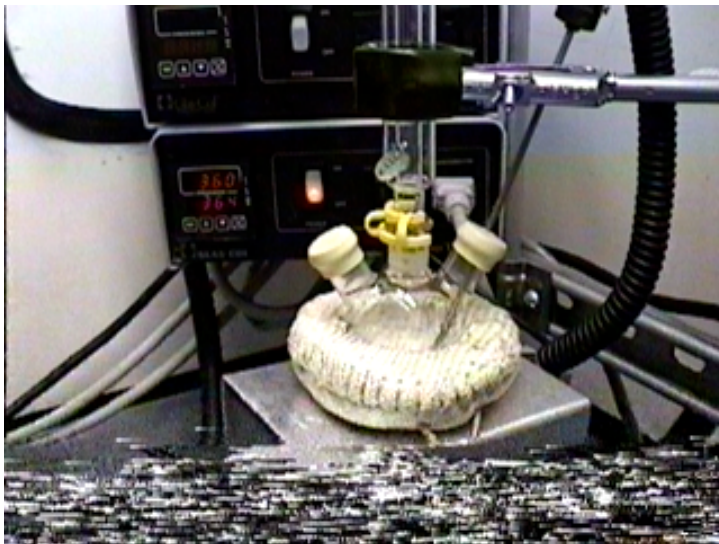


Sólhlaða byggð á skammtapunktum

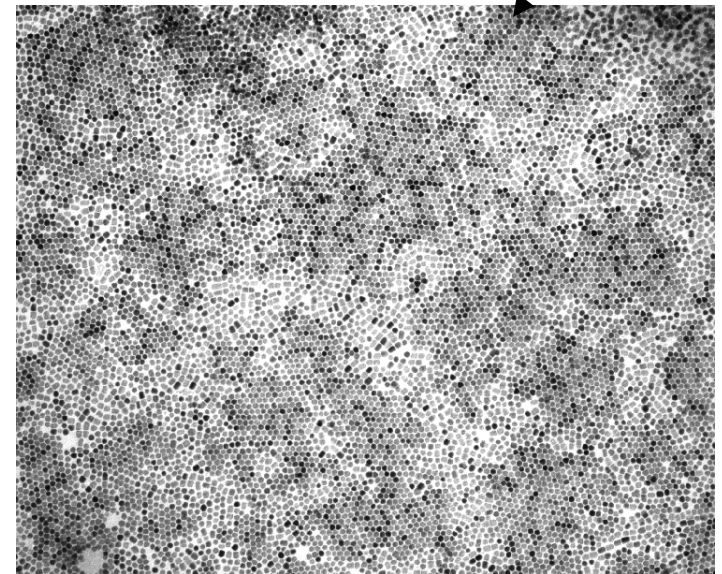


Hvernig er hægt að búa til efnisagnir af tiltekinni (nanó)stærð?

Stuttu eftir að hvarfefnum er helt saman, er bætt við sameindum sem 'húða' kristallana sem myndast og þannig stöðva frekari vöxt kristallanna. Síðan er leysirinn blandaður þannig að stærstu kristallarnir falla út. Hægt að ná stærðardreifingu sem er innan við 5% þegar vel lætur.

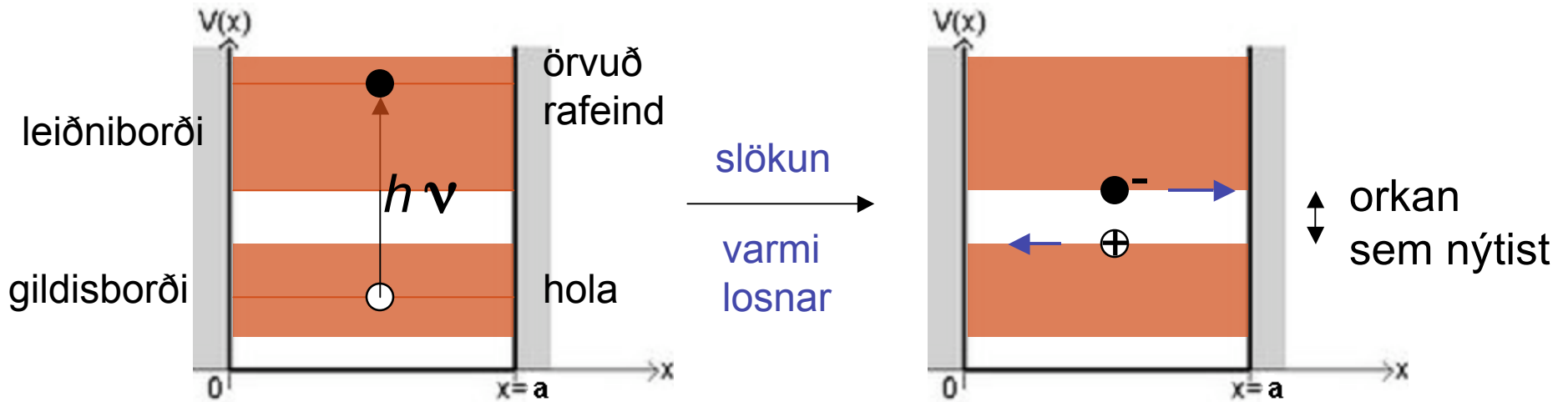


7nm CdSe nanókristallar



En, kristallar hafa margar rafeindir - ekki bara eina

Orkuprepin mynda 'borða'. Í hálfleiðurum er orkubil milli borða sem í eru rafeindir og borða sem örvaðar rafeindir geta komist í



Kerfið gleypir ljóseind.
Örvað rafeind og hola myndast.

rafeindar-holu par, rafstraumur fæst með því að rafeindin og holan fara í sitt hvora áttina

Nýting sólhlaða á orku ljóseindanna er, að meðaltali, ekki góð m.a. vegna varmamyndunar við slökun rafeindar-holu parsins

Nýjar, hvetjandi niðurstöður (2004)

VOLUME 92, NUMBER 18

PHYSICAL REVIEW LETTERS

week ending
7 MAY 2004

High Efficiency Carrier Multiplication in PbSe Nanocrystals: Implications for Solar Energy Conversion

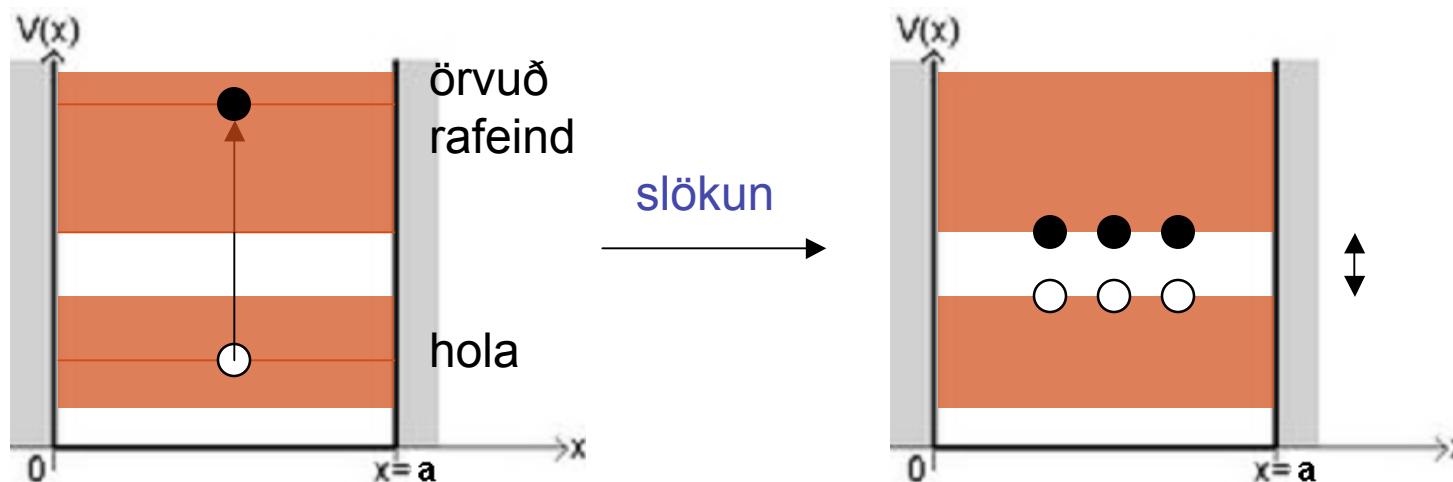
R. D. Schaller and V.I. Klimov

Chemistry Division, C-PCS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, USA

(Received 25 November 2003; published 5 May 2004)

We demonstrate for the first time that impact ionization (II) (the inverse of Auger recombination) occurs with very high efficiency in semiconductor nanocrystals (NCs). Interband optical excitation of PbSe NCs at low pump intensities, for which less than one exciton is initially generated per NC on average, results in the formation of two or more excitons (carrier multiplication) when pump photon energies are more than 3 times the NC band gap energy. The generation of multiexcitons from a single photon absorption event is observed to take place on an ultrafast (picosecond) time scale and occurs with up to 100% efficiency depending upon the excess energy of the absorbed photon. Efficient II in NCs can be used to considerably increase the power conversion efficiency of NC-based solar cells.

Mældu örvun
PbSe
nanókristalla



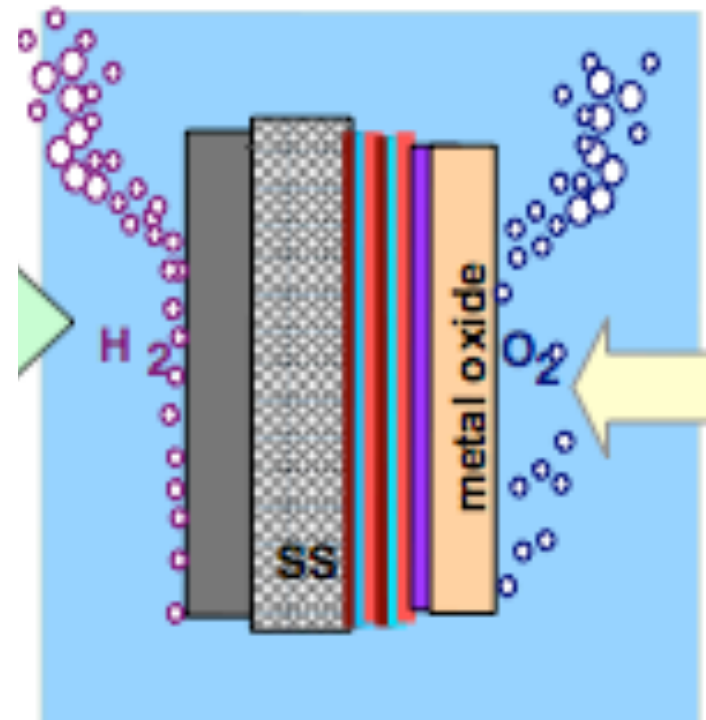
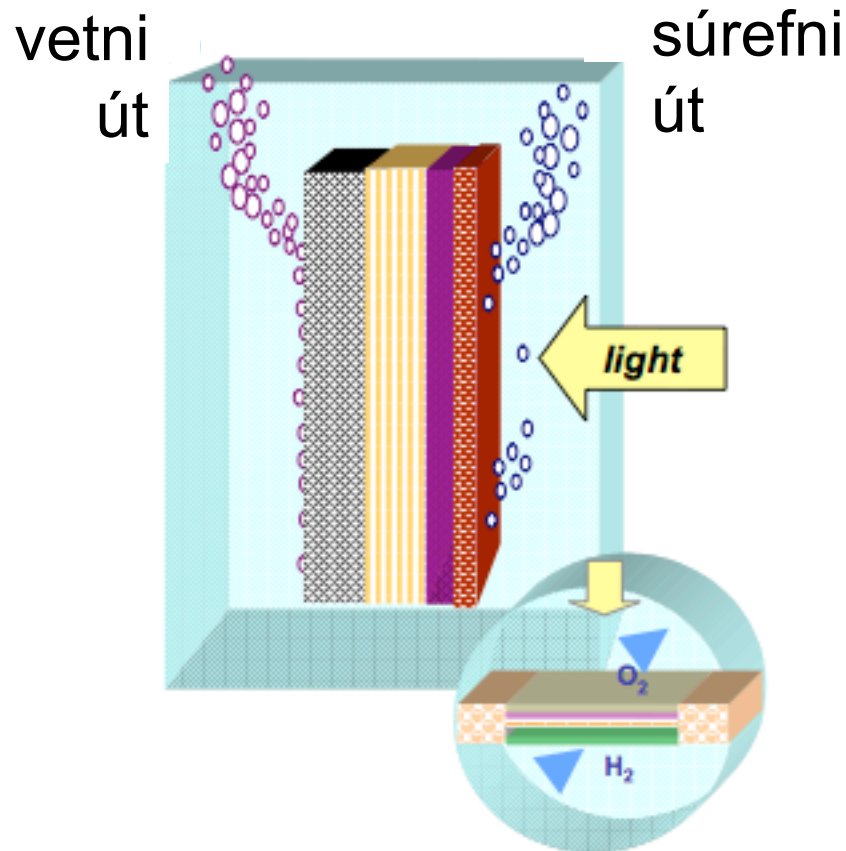
Þrjú rafeindar-holupör myndast fyrir ljóseindir með næga orku!

Mikilvægi fyrir sóhlöður

- Hugsanlega hægt að ná **60%** nýtingu á orku ljóseindanna (u.þ.b. tvöföldun).
- Enn eitt dæmið sem sýnir hvernig **nanókerfi** geta stórbætt tæknina.
- Enn hægt að finna nýja, áhugaverða hluti í **grundvallarhegðun** - margt sem á eftir að uppgötva.

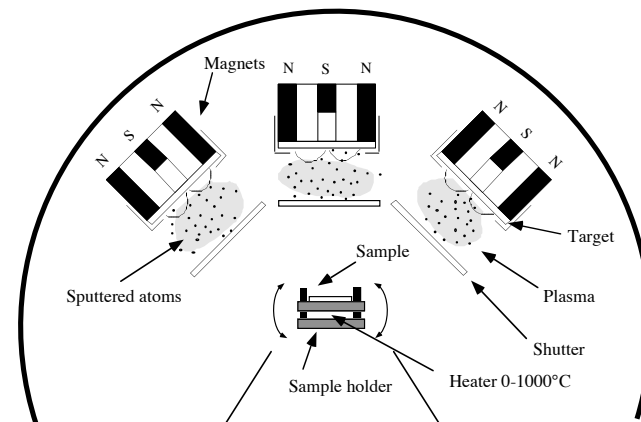
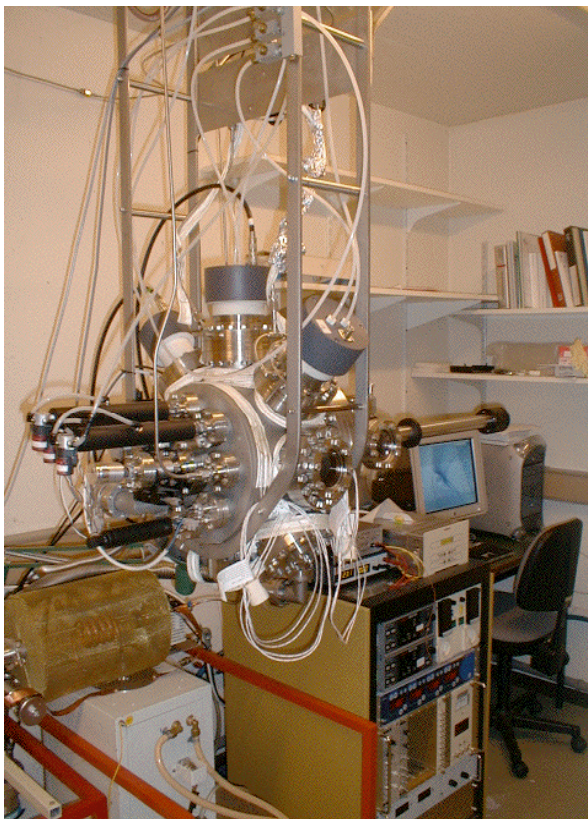
Önnur dæmi um nanókerfi tengd orkunýtingu:

Sólhlöður sem mynda vetni



Leit að nýjum efnum til að geyma vetni

Samvinnuverkefni Sveins Ólafssonar á eðlisfræðistofu HÍ, og HJ



mynda þunn
lög með því
að senda
á sýnið tilgreind
atóm

Co-sputtering with
 H_2 , N_2 and O_2
possible

Substrate 1.0 mm

Nú er hægt að mæla upptöku
vetnis án þess að færa sýnið!

Bjólfur

Tölvuklasi í HÍ: 131 örgjörri með 2.8 GHz reiknieiningar, 1 GB minni og 1 Gb nettengingu

Notkun: efnafræði, eðlisfræði, verkfræði

Styrkt af:
RANNÍS,
og HÍ



Spáð fyrir um eiginleika efna með tölvureikningum

Markmið:

- **Nota grundvallarjöfnur eðlisfræðinnar og tölvur til að reikna út eiginleika efna, jafnvel efna sem aldrei hafa verið mynduð.**
- **Miklar framfarir á undanförunum tveimur áratugum.**

Aðferðir:

- A. Leysa bylgjujöfnu rafeindanna - gefur orku og kraft!**
- B. Færa til atómin til að finna stöðuga staðsetningu atóma svo og gang og hraða efnabreytinga.**

ab initio útreikningar byggðir á skammtafræði

Paul Dirac, 1929:

The fundamental laws necessary for the mathematical treatment of large parts of physics and the whole of chemistry are thus fully known, and the difficulty lies only in the fact that application of these laws leads to equations that are too complex to be solved'.

$$H\Psi = E\Psi$$
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i^n \nabla_i^2 \Psi - \sum_i^n \sum_j^N \frac{Z_N e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_i^n \sum_{i'}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_{i'}|}$$

N kjarnar (breyta j), n rafeindir (breytur i og i')

Stórstígar framfarir í aðferðafræðinni á síðustu 20 árum

Samantekt

- Grunnrannsóknir sem og verkfræðivinnu sárvantar til að glíma við orkuvandamálið sem blasir við mannkyninu.
- Rannsóknir á nanókerfum opna nýjar víddir í rannsóknum á hagnýtingu orku, t.d. sólhlöður, vetnisgeymsla, betri leiðarar fyrir rafmagn, ...
- Fleira fólk þarf að sinna þessum málum!