

Suomen supertietokoneet hiukkaspommituksen jäljillä

12.8.2008 13:10 — Kalevi Nikulainen

Helsingin yliopiston materiaalfysiikan osaston tutkimusryhmä on luonut realistisen atomimallin, jolla tutkitaan valonvahvistusta. Mallin avulla ryhmä on simuloinut tieteen tietotekniikan keskuksen CSC:n supertietokoneilla ionijälkien muodostumista ja selvittänyt, mitä piin elektronisille ominaisuuksille tapahtuu hiukkaspommituksessa.

Puolijohde on materiaali, jonka sähkönjohtavuutta voidaan kontrolloida lämpötilaa muuttamalla tai epäpuhtauksilla. Tavanomaisimpien puolijohdeiden optiset ominaisuudet ovat kysytyjä optoelektronisissa laitteissa.

CSC:n mukaan uusi nanokiteitä hyödyntävä lähestymistapa on tuonut käden ulottuville paljon toivotun piipohjaisten elektronisten laitteiden yhdistämisen optisiin piireihin samoilla edullisilla piisiruilla.

Italialainen tutkimusryhmä on osoittanut, että piinanokiteet upotettuna kiteytymättömään piidioksidiin voivat tuottaa keskitettyä laservaloa. Rajapinnan virheiden luonne selittää ilmiön osittain.

Molekyylidynamiikkaa käyetty hyväksi

Jotta voidaan selvittää rajapintavirheiden luonne ja niiden osuus nanokiteiden ja epäjärjestyneiden aineiden valonvahvistuksessa, on tärkeää, että systeemistä on luotettava atomimalli. **Flyura Djurabekova** ja hänen tutkimusryhmänsä Helsingin yliopiston materiaalfysiikan osastolta ovat luoneet realistisen atomimallin molekyylidynamiikan (MD) avulla.

Mallin avulla saa perusteellisen käsityksen rajapintavirheiden luonteesta. Ryhmän analyysit virheistä paljastivat suuren määrän koordinaatiovirheitä, jotka täytyy passivoida systeemin optisten ominaisuuksien parantamiseksi. Simulaatiot osoittivat myös pii-happi-kaksoissidosten olemassaolon. Näiden sidosten tiedetään olevan säteilykeskuksia piinanokiteen ja epäjärjestyneen piidioksidin rajapinnassa.

Nanokiderakenteiden ionisäteilytys, joka on osa optoelektronisten laitteiden valmistusprosessia, aiheuttaa suurina annoksina nanokiteisen rakenteen muuttumisen epäjärjestyneeksi. Nanokiteiden pieni koko saattaa muuttaa aineen amorfoitumiskäyttäytymistä. MD-simulaatioiden avulla tutkimusryhmä selvitti, että upotettujen nanokiteiden amorfointiannokset, sekä piissä että germaniumissa, ovat yli kolme kertaa pienemmät kuin vastaavissa yksikiteisissä materiaaleissa.

Rakenteiden ymmärtäminen

Erittäin suurenergiset raskaat ionit, kuten kulta, aiheuttavat elektronisen virittymisen takia vahingoittuneita alueita, ionijälkiä, kulkiessaan materiaalin läpi. Viimeisimmät kokeet epäjärjestyneestä piistä osoittivat ensimmäistä kertaa ydin-kuorihienorakenteen ionijäljissä.

Tutkimusryhmä tutkii jälkien muodostumista MD-simulaatioiden avulla ja on pystynyt todistamaan, että jäljessä on alitiheä ydin ja ylitiheä kuori. Simulaatioissa jäljen mitat vastaavat hyvin kokeellisia tuloksia. Ionijälkien rakenteen ja muodostumisen ymmärtäminen on tärkeää materiaalitieteissä ja ydinfysiikassa, jotta saadaan käsitys materiaalien vaurioista ja muutoksista. Myös geokronologia, arkeologia ja planeettainvälisen aineen tutkimus hyötyvät ionijälkien tutkimuksesta.

Tutkimusryhmä on myös vertaillut tavallisen, kiteisen piin ja epäjärjestyneen piin elektronista rakennetta. Tutkimus on tärkeää, jotta voidaan paremmin ymmärtää, mitä tapahtuu piin elektronisille ominaisuuksille hiukkaspommituksessa, jossa esimerkiksi piianturit hiukkaskiihdyttimissä ovat.

CSC:n mukaan tutkimus on vielä kesken, mutta alustavat tulokset valaisevat, mitä tapahtuu piin energia-aukolle, kun materiaali muuttuu epäjärjestyneeksi ja minkälainen elektronirakenne materiaaliin muodostuu. Energia-aukko ja uudet elektronitilat määräävät suurelta osin kuinka puolijohhteesta, kuten piistä, tehty laite toimii.

<http://www.digitoday.fi/tiede-ja-teknologia/2008/08/12/suomen-supertietokoneet-hiukkaspommituksen-jaljilla/200820807/66>