

Termoelektriske materialer – vejen til en grønnere fremtid?

Af Christian Moeslund Zeuthen

Det står efterhånden klart for os alle, at vi står midt i en global klimakrise, som er forårsaget af vores støt stigende energiforbrug. Brugen af kul, olie og gas udleder store mængder CO₂, og præcis derfor er det vigtigt at finde andre måder at producere elektricitet på. Det er desværre ikke altid muligt at undgå fossile brændstoffer, og derfor er det vigtigt at udnytte dem så effektivt som muligt. Desværre bliver op til **67%** af energien spildt, ofte i form af overskudsvarme! Det er her, termoelektrika kommer ind i billedet.

Termoelektrika kan omdanne varme direkte til elektricitet og derved potentielt udnytte den ellers spildte energi. Desværre har de fleste termoelektriske materialer lav effektivitet, høj ustabilitet og er ofte lavet af giftige eller sjældne grundstoffer.

Det er netop denne problemstilling som mit ph.d.-projekt omhandlede. Jeg har brugt forskellige metoder til at forstå mekanismerne bag et materiales termoelektriske egenskaber og så brugt den viden til at lave nye, forbedrede termoelektrika med højere effektivitet og bedre stabilitet.

Hvad er et termoelektrisk materiale?

Som nævnt kan termoelektriske materialer omdanne varme til elektricitet, og de kan faktisk også gøre det omvendte. De gør det helt uden bevægelige dele, simpelthen fordi materialet af sig selv danner strøm, når det bliver udsat for en varmem forskel. Det har NASA udnyttet allerede siden 1960'erne, hvor de begyndte at bruge termoelektriske moduler i deres missioner til det ydre rum, f.eks. i de kendte Voyager-rumsonder. Her brugte man et radioaktivt materiale, som f.eks. plutonium, til at varme det termoelektriske modul. Det genererer så elektricitet til de mange videnskabelige instrumenter ombord på sonderne i flere årtier! De termoelektriske moduler, som sidder ombord på Voyager, arbejder stadig ved over 80% af den oprindelige kapacitet, selvom det er 42 år siden, den blev sendt afsted.

På et lidt mere jordnært plan kender man måske fænomenet fra lydløse køleskabe. De bliver kølet ved hjælp af et termoelektrisk modul, som man sender strøm gennem. Herved bliver der dannet en varmem forskel, og køleskabet bliver koldere. Men på trods af, at teknologien har været brugt siden 60'erne, er den stadig relativt ukendt og ubrugt. Hvordan kan det være?

Det er fordi de materialer, der bliver brugt til termoelektriske moduler enten er for dårlige eller for dyre. Effektiviteten (dvs. hvor meget af energien der bliver omdannet) af de bedste materialer ligger kun mellem 10-20 %, hvorimod andre metoder til at generere elektricitet, såsom kernekraft, kul/olie og solceller, alle ligger mellem 30-50%. Derudover er de grundstoffer som indgår i termoelektriske materialer ikke de mest hensigtsmæssige. Et af de bedste nuværende termoelektrika er "PbTe" eller "Bly-tellurid", som indeholder bly og tellur. Bly er et giftigt metal, som kan give mange sundhedsproblemer. Derfor er det langt fra ideelt at bruge materialer, der indeholder bly. Tellur er også giftigt, men derudover også meget sjældent. Derfor vil det være dyrt og næsten umuligt at fremstille materialer nok til at gøre en reel forskel, hvis man bruger bly-tellurid.

Derfor er forskning i termoelektrika vigtig, hvis der skal være noget håb om, at de kan bruges i kampen mod klimaforandringerne. Enten skal man forbedre effektiviteten af de nuværende materialer, eller også skal man finde nye termoelektriske materialer, som indeholder billigere og ufarlige grundstoffer. I min ph.d. har

jeg gjort begge ting, hvilket jeg vil komme ind på senere. Men for at kunne forbedre eller finde nye materialer er det vigtigt at forstå, hvor materialerne får deres egenskaber fra.

Hvordan fungerer et termoelektrisk materiale?

Som nævnt tidligere genererer et termoelektrisk materiale strøm, når det bliver udsat for varme. Mere præcist skal materialet bruge en temperaturgradient, altså en kold og en varm side. På denne måde vil elektronerne bevæge sig fra den ene side af materialet til den anden, hvilket genererer strøm. Elektronerne skal kunne bevæge sig nemt inden i materialet, det vil sige, det skal være elektrisk ledende. Derfor kunne man tænke, at et materiale som f.eks. kobber ville være godt. Desværre er det ikke nok, at elektronerne skal bevæge sig nemt, de skal også have meget energi per elektron. Elektronerne i kobber har lav energi, og derfor er kobber et dårligt termoelektrisk materiale.

I stedet skal man finde et materiale, hvor elektronerne har høj energi, men også kan bevæge sig nemt. Denne optimering resulterer i, at halvledere er de bedste materialer. I halvledere kan elektroner med lav energi ikke bevæge sig, og derfor er de ideelle som termoelektriske materialer.

En anden vigtig ting er, at det termoelektriske materiale bliver ved med at have en temperaturgradient så længe som muligt. Når man har en kold og en varm side, vil varmen blive transporteret igennem materialet og opvarme den kolde side. Derved bliver temperaturforskellen udlignet, og det termoelektriske modul holder op med at producere elektricitet. Derfor skal materialerne også have lav termisk ledningsevne, altså basalt set være gode isolatorer.

Desværre er disse ting ofte sammenkædet på en måde som er dårlig for os; det er ikke trivielt at finde et materiale med høj elektriske ledningsevne, høj energi i elektronerne og lav termisk ledningsevne. Derfor er den forskning, som vi laver, essentiel, når det kommer til at finde materialer, der opfylder alle de krav vi lige har stillet op. Dog er det vigtigt ikke kun at finde materialer, hvor de er opfyldt, men også at finde ud af **hvorfor** de har de favorable egenskaber. Hvis vi ved hvorfor, så kan vi måske bruge den viden til at udvikle nye materialer, som vi ellers aldrig havde overvejet.

Hvordan får materialer deres egenskaber?

Der findes ufattelig mange materialer her på vores jord, som kan vidt forskellige ting. Lige fra gennemsigtigt glas til uigennemtrængeligt panser, fra plastik som kan formes i alle former, til beton som holder gigantiske bygningsværker. Overalt omkring os er der fantastiske materialer. Men hvad gør materialerne forskellige? Alt er lavet af atomer af forskellige grundstoffer som ilt, kulstof, hydrogen, jern osv. Men det er ikke kun typen af grundstof, som er vigtig for, hvordan et materiales egenskaber bliver. Lad os se på et eksempel: kulstof. Kulstof findes i mange ting omkring os, men i sin rene form er det bedst kendt som grafit. "Blyet" i en blyant er i virkeligheden mest grafit. Derudover bruger man det som smørremiddel, da det er meget blødt. En anden form for kulstof, som de fleste kender, er diamant. Diamant er, i modsætning til grafit, meget hårdt. Derudover er diamanter gennemsigtige, meget ulig den sorte grafit.

Både diamant og grafit er 100% kulstof, så hvorfor er deres egenskaber så forskellige? Det hele afhænger af, hvordan de enkelte atomer sidder i forhold til hinanden, og hvordan deres kemiske bindinger er. I grafit er de enkelte kulstof-atomer bundet stærkt til hinanden i to dimensioner, mens de er stærkt bundet i tre dimensioner i diamant. Altså har små forskelle på det atomare niveau en kæmpe indflydelse på materialers makroskopiske egenskaber, altså egenskaber som vi kan tage og føle på.

Det samme gælder for termoelektriske materialer. De egenskaber, som blev nævnt i sidste sektion, bliver også bestemt af, hvordan atomerne sidder. Derfor har min forskning været fokuseret på at sammenkæde den atomare struktur med de fysiske egenskaber af termoelektriske materialer.

Hvordan måler man atomers positioner

Det er ikke helt simpelt at måle enkelte atomers position, og faktisk heller ikke engang at måle, hvilket grundstof de er. Det er fordi, atomerne er så små, at det er umuligt at se dem med almindeligt lys, da bølgelængden er for stor. Derfor er man nødt til at bruge lys, der har en meget kortere bølgelængde; røntgenstråling. Man kender nok bedst røntgenstråling fra hospitalerne, hvor det bruges til at undersøge potentielt brækkede knogler, men det er også et uundværligt værktøj for en materialekemiker.

For røntgenstråling kan lige præcis bruges til at "se" atomerne inden i et materiale. Dog ikke helt på samme måde som vi ser ting med f.eks. et mikroskop. Med et mikroskop ser vi lys, der bliver reflekteret af et objekt. Vores øjne og hjerne omsætter nemt det reflekterede lys til billeder, som vi kan genkende. Når vi sender røntgenstråler ind på et materiale, sker der noget andet. Røntgenstrålerne bliver ikke **reflekteret**, men i stedet bliver de **diffrakteret**. Diffraction sker, når flere bølger interagerer med hinanden. Måske har man engang i fysik prøvet at skinne en laser gennem et fint gitter og observeret flere distinkte prikker på væggen. Det samme sker i et materiale, når vi skinner røntgenstråling gennem det. Atomerne sidder meget fint på rad og række, og virker derfor som gitter, vi kan diffraktere gennem. Derfor hedder teknikken også røntgendiffraction. Vi måler diffraktionsmønsteret og modellerer så atomernes position, bevægelse og type af grundstof ud fra det.

Det lyder måske fantastisk, at man kan måle alle de her ting bare ved hjælp af røntgenstråling, men det skyldes, at vi kan snyde en lille smule. Et gram af et materiale indeholder millioner af milliarder atomer, faktisk over 10^{20} , altså et 1-tal med 20 nuller efter. Det er ikke muligt at modellere så mange atomer, ikke engang for en supercomputer. Men: fordi atomerne i materialet står på rad og række er det muligt at repræsentere **hele** materialet blot ud fra en enkelt byggesten, som vi kalder enhedscellen. Enhedscellen indeholder kun få atomer, for det meste under 20, og hele materialet er så bygget op af milliarder af disse, lidt ligesom legoklodser. Altså kan vi nøjes med at modellere enhedscellen. Derfor får vi også høj præcision på hvert atom i enhedscellen, da det indeholder information fra ALLE enhedsceller i materialet.

Med røntgenstråler kan vi altså måle den præcise atomare opbygning af et materiale, og derved sammenkæde den med de fysiske egenskaber! For at kunne gøre det hurtigt, effektivt og præcist har man brug for meget store røntgenfaciliteter. Det hedder synkrotroner, og de kan producere ekstremt høj "lysstyrke". Danmark har for nyligt investeret i en ny synkrotron i Lund, lidt udenfor Malmö, som er et fantastisk værktøj, som snart er klar til brug.

Fysiske egenskaber og atomar struktur

Som nævnt tidligere har min ph.d. fokuseret på at sammenkæde de fysiske egenskaber med de atomare. Derfor har vi udviklet en opsætning, som kan måle de fysiske egenskaber af termoelektriske materialer samtidig med, at vi måler røntgendiffraction. Det specielle med opsætningen er, at den kan måle det hele i *real time*. Vi kan altså følge, hvordan den atomare struktur ændrer sig, samtidig med at det termoelektriske materiale bliver brugt. Det giver os unikke muligheder for at forstå, hvordan og hvorfor nogle termoelektriske materialer bliver nedbrudt, og komme med idéer om, hvordan nedbrydningen kunne stoppes.

Vi har også udviklet nye materialer, som er blevet testet i denne opsætning. Eksempelvis et stof som kun indeholder billige grundstoffer og uden samme sundhedsrisiko som de blyholdige materialer.

Derudover har vi fokuseret på at forbedre teknikken røntgendiffraction. Selve modelleringsmetoden er temmelig kompliceret, og derfor er der stadig plads til forbedringer. Vi har videreudviklet teknikken, så den f.eks. mere præcist kan bruges til at bestemme indholdet af grundstoffer i en prøve. Alle disse delprojekter er blevet udført sideløbende med samarbejde med industrielle partnere, som er interesseret i at bringe termoelektriske løsninger ud til den bredere befolkning.