



Laskennallinen materiaalfysiikka ja uudet teknologiat

Risto Nieminen



Piitekologia ja miniatyrisointi kohtaavat kenties jo 10-15 vuoden kuluttua fysikaaliset rajansa. Komponenttien pienestä koosta johtuvat sähkökenttien suuret voimakkuudet, virrantiheyksistä aiheutuva lämpeneminen, materiaaleille asetettavat laatuvaatimukset sekä kvanttimekaaniset ilmiöt tulevat vaikeiksi hallita. Yksinkertaisin ratkaisu olisi tietysti löytää korvaavia puolijohteita, joiden avulla nykyisellä teknologiapolulla voitaisiin jatkaa. Toisaalta uudet anturi- ja sensorirakenteet sekä biomateriaalit tarjoavat uusia mahdollisuuksia. Analogisen ja digitaalisen erokin ehkä hämärtyy tulevaisuudessa. On mahdollista, että pitkällä aikavälillä tietoteknologia perustuu taas täysin analogisiin komponentteihin, digitaalitekniikan näytellessä vain sivuosaa.



Ihmisen hyödyntämät teknologiat ovat aina perustuneet erilaisten materiaalien hyväksikäyttöön. Kehitys on kulkenut kivistä, luusta, puusta, savesta ja kasveista perusmetallien, keraamien sekä paperien jalostuksen kautta monenlaisiin synteettisiin materiaaleihin, muoveihin ja komposiitteihin. Historian aikakausia ja paikallisia kehitysjaksoja on nimetty materiaalien mukaan. Kaikille tuttuja ovat kivi-, pronssi- ja rautakausi sekä Alaskan kultakuume tai Kainuun tervakausi. Nyt elämme keskellä informaatioteknologian vallankumousta, jota luonnehtivat monipuolisten data- ja tietoaisteiden käsittely- ja siirtonopeuksien räjähtävä kasvu sekä kaikkialle ulottuva nopea tietoliikenne. Digitaalisuus ja virtuaalisuus ovat päivän sanoja, jotka korostavat informaatioteknologian aineetonta puolta. Informaatioteknologian tapahtunut ja tuleva kehitys perustuvat kuitenkin ratkaisevasti fysikaalisten signaalien synnyttämiseen, tallentamiseen, välittämiseen ja havaitsemiseen. Signaalit voivat olla sähköisiä, magneettisia, optisia, termisiä tai mekaanisia. Niiden fysikaalinen hallitseminen yhdessä uusien materiaalien määrätietoisen tutkimuksen ja kehittämisen kanssa on tämänkin teknologian perusta.




Monen mittakaavan materiaali-ilmiöt

Materiaalitutkimukselle tyypillinen piirre on monimittakaavaisuus. Kaikki aine koostuu atomeista, joiden kokoluokka on $10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$ (nanometri) $= 1 \text{ \AA}$ (ångström). Atomit sitoo kiinni toisiinsa elektronien "liima". Tämän *atomistisen* mittakaavan ilmiötä hallitsee täysin kvanttimekaniikka, joka on monesti makromaailman toimijan mielestä intuition vastainen ja outo teoria. Kvanttimekaniikka toimii kuitenkin hämmästyttävällä tarkkuudella ja antaa siten erinomaisen pohjan atomimaailman ilmiöiden ennustamiseen. Se selittää muun muassa, miten kemiallinen sidos syntyy, miksi aine voi olla suprajohtava tai miten laservaloa saadaan aikaiseksi. Kuutiokesanometrissä ainetta on n. 10^{23} atomia. Näin suurta atomijoukkoa ei voi käsitellä erillisinä. Suoritamme karkeistuksen, jonka tuloksena kuvaamme materiaa jatkumona - kiinteänä aineena, nesteinä tai kaasuna. Sen fysikaalisia ominaisuuksia kuvaavat *makroskooppiset* suureet, kuten lujuus, kovuus, sähköjohtavuus, väri, reaktiivisuus. Fysikaalisia ilmiötä voidaan kuvata "klassisilla" jatkumoyhtälöillä, jotka sitovat toisiinsa fysikaaliset perussuureet ja materiaaliominaisuudet.




Makro- ja atomiskaalojen välissä on *mesoskooppinen* alue, jonka tyypillinen pituusmitta on $10^{-6} \text{ m} = 1 \text{ \mu m}$ (mikrometri). Tässä mittakaavassa toimivat esimerkiksi mikroelektronikan komponentit, jotka käsittelevät sähköisiä ja magneettisia signaaleja. Myös monet materiaalien lujuusominaisuudet riippuvat niiden mesoskaalan rakenteesta, jota kuvaavia käsitteitä ovat mm. rakeisuus, huokoisuus sekä säännöllisessä atomirakenteessa esiintyvät virheet kuten dislokaatiot ja pinousviat. Mesoskaala on niinkään tyypillinen biologisten ilmiöiden ja biomateriaalien tutkimuksessa. Mesoskooppisella alueella kvantti- ja klassinen fysiikka kohtaavat, usein teoreettisesti hyvin haastavalla tavalla.






Materiaali-ilmiöihin liittyvät aikaskaalat voivat myös olla hyvin erilaisia. Eräät atomaariset prosessit, kuten valoa synnyttävät optiset transiitot, ovat kestoltaan 10^{-15} s (femtosekunti). Atomaaristen ja molekylääristen rakenteiden muutokset, kuten proteiinien laskostuminen tai atomien diffuusio tiiviissä aineessa, tapahtuvat tyyppillisesti nanosekuntien (10^{-9} s) tai mikrosekuntien (10^{-6} s) aikaskaalassa. Toisaalta monet tekniikan kannalta tärkeät ilmiöt, kuten teräksen väsyminen tai polymeerien haurastuminen, ovat kestoltaan jopa vuosien (10^7 s) mittaisia.




Materiaalifysiikan tutkimuksen tavoitteisiin kuuluu yhteyksien luominen eri mittakaavan ilmiöiden välillä, ängströmeistä metreihin ja femtosekunneista vuosiin. Teoreettiselta kannalta tämä on loppumaton haaste ja tehtävä. Vaikka materiaalien kannalta relevantit luonnon perusvoimat ja vuorovaikutukset tunnetaan (sähkömagnetismi), ilmiöiden ja rakenteiden kompleksisuus kasvaa hyvin nopeasti siirryttäessä mittakaavassa pienemmästä suurempaan. Suuren, monimutkaisen atomijoukon käyttäytymistä ei voida ennustaa vain sen osasten ominaisuuksista. Kullakin mittakaavan ja kompleksisuuden tasolla esiintyy kokonaan uusia ilmiöitä. Niiden ymmärtäminen vaatii tutkimustyötä, joka on luonteeltaan aivan yhtä "fundamentaalista" kuin pienimpien osasten ja niiden vuorovaikutusten tutkiminen. Tiiviin aineen ja materiaalien fysiikka on monihiukkasfysiikkaa. Hiukkaset noudattavat hiukkasfysiikan lakeja, mutta materiaalifysiikka ei ole sovellettua hiukkasfysiikkaa. Samalla tavoin kemia ei ole sovellettua materiaalifysiikkaa, eikä molekyylibiologia ole sovellettua kemiaa. Vaikka solubiologian objektit noudattavat molekyylibiologian lakeja, solubiologia ei ole vain mikrobiologian soveltamista. Psykologia ei ole sovellettua biologiaa, eikä biologia sovellettua kemiaa [1].




Aivan kuten yleensäkin yhteyksien luominen eri tieteenalojen välillä, monimittakaavainen lähestymistapa materiaalitutkimukseen on mitä hedelmällisintä. Eri tilanteisiin ja eri mittakaavoihin on kehittynyt omia kuvailevia kieliä ja teorioita, joiden pätevyysalueet menevät osin päällekkäin ja osin jättävät väliinsä aukkoja. Hyvin paljon jännittävää tutkimusta tehdään juuri näillä kohtaamis- ja katvealueilla.


Materiaalit ja informaatioteknologia



Esimerkkejä modernin materiaalitutkimuksen saavutuksista voi luetella lähes loputtomasti. Puolijohteet mahdollistivat viisikymmentä vuotta sitten transistorin keksimisen, mistä alkanut informaatioteknologinen murros jatkuu yhä. Sen virstanpylväitä ovat integroidun piiriteknologian kehittäminen vuonna 1961 sekä mikroprosessorin julkistaminen vuonna 1972. Toinen sen kehittäjästä, Jack Kilby, palkittiin vuoden 2000 fysiikan Nobel-palkinnolla.



Electronics -lehden huhtikuun 19. päivän numerossa vuonna 1965 ilmestyi Intel-yhtiön perustajan Gordon Mooren artikkeli, jossa hän visioi, että piikiekolle integroitujen elektronisten piirien kompleksisuus tulisi kaksinkertaistumaan joka vuosi seuraavan kymmenen vuoden ajan. Moore ennusti, että vuonna 1975 n. puolen neljösentin piisirulle mahtuisi jopa 65000 transistoria. Ennuste toteutui. Vuonna 1975 Moore tarkensi sitä hieman, arvioiden että transistorien määrä sirulla kaksinkertaistuisi 18 kuukauden välein. Tämä "Mooren laki" kutsuttu ennuste on toteutunut hämmästyttävän hyvin yli kahdenkymmenen vuoden ajan, ja se näyttää toteutuvan myös ainakin seuraavan vuosikymmenen ajan. Sillä on myös ollut ja on edelleen tärkeä psykologinen vaikutus mikroelektronikkateollisuudessa ja se on siten ollut erällä tavalla itsensä toteuttava ennuste.



Mooren lain fysikaalisia selittäjiä ovat elektroniikan perusmateriaali, puolijohtava pii, planaaritknologia sekä piirien optinen litografia. Pii (Si) ei suinkaan ole ensimmäinen käytetty puolijohdemateriaali. Sitä edelsivät mm. kuparioksidi (CuO_2), seleeni (Se) ja germanium (Ge). Piiin ylivoimaisuus elektroniikkamateriaalina ei perustu niinkään sen omiin puolijohdeominaisuuksiin kuin siihen, että se muodostaa helposti stabiilin oksidin (SiO_2). Tämä oksidi on hyvä eriste ja sitä on helppo etsata. Nämä ominaisuudet mahdollistavat planaaritknologian, jossa transistorit tehdään suoraan tasomaiselle piikiekolle ja eristekerrokset sekä langoitukset lisätään niiden päällisinä kerroksina. Litografiassa käytetään sofistikoitua valokuvatekniikkaa uurtamaan yhä hienompia piirteitä piisirulle. Alkuperäinen bipolaarinen transistori

korvautui planaariteknologiassa vähitellen nk. MOSFET-komponenteilla, jotka nykyisin dominoivat sekä prosessoritettä muistipiirejä. Piirien miniatyrisointia ja integrointiastetta kuvataan usein MOSFET-transistorin veräjän leveydellä. Tällä hetkellä kaupallinen valmistus käyttää tyypillisesti 0.30 mikrometrin (300 nanometrin) viivanleveyttä.

Vaikka pii pitää pintansa puolijohdeteknologian perusraaka-aineena tulevaisuudessakin, muita materiaaleja on tullut ja tulee jatkossakin markkinoille. Optoelektronisiin ja lasersovelluksiin pii ei sovi. Siksi mm. optiseen tiedonsiirtoon ja laserkirjoittimiin käytetään nk. yhdistepuolijohteita (mm. galliumarsenidi, GaAs), samoin kuin CD-teknologiaan tai matkapuhelimien suurtaajuussovelluksiin. Yhdistepuolijohdekomponentit vaativat aivan uudenlaisen, atomistisesti kontrolloidun valmistustekniikan. Zhores Alferov Pietarista ja Herbert Kroemer Santa Barbarasta ovat tämän tekniikan pioneerejä, jotka myös palkittiin vuoden 2000 fysiikan nobelisteina. Gallium-, alumiini- ja indiumnitridit (GaN, AlN, InN) ovat esimerkkejä uusista lupaavista optoelektronisista materiaaleista.

Puolijohde- ja mikroelektroniikkateollisuus on vuodesta 1991 lähtien viitoittanut tavoitteensa nk. Silicon Technology Roadmap -nimiseksi ohjelmaksi. Se noudattaa pääpiirteissään yllämainittua Mooren lakia. Ohjelma ennustaa muun muassa, että vuonna 2010 transistorin viivanleveys on 50 nanometriä ja että muistipiirien kapasiteetti on 64 gigabittia. Prosessorien kellotaajuudet kasvavat hitaammin, kuitenkin niin että 1 gigahertsin raja ylittyy jo lähiaikoina. Ohjelman toteutumiselle ei ole varsinaisia teknologisia esteitä; sitä voidaan pitää jopa hieman konservatiivisena. Lähivuosisikymmenen aikana tärkeimmät rajoittavat tekijät ovat luonteeltaan taloudellisia.

Materiaalitutkimuksen kolme kivijalkaa

Moderni materiaalitutkimus rakentuu kolmen kivijalan varaan. Materiaalien *valmistus* edellyttää monipuolista synteesi- ja prosessointiosaamista, kuten atomistisia kasvatustekniikoita, ioni- ja atomisuihkuja sekä vaativien olosuhteiden (korkea paine, korkea lämpötila jne.) hallintaa.

Materiaalien *karakterisointiin* on oltava käytettävissä erilaisia menetelmiä, joiden avulla niiden fysikaalisia ja kemiallisia ominaisuuksia voidaan tutkia näytteitä rikkomatta ja tarvittaessa atomitason resoluutiolla. Karakterisoinnin kehitys on viime vuosikymmenet ollut huimaa, ja nykyisin materiaalitutkimuksen käytössä on monipuolinen arsenaali menetelmiä. Ne ulottuvat pienlaboratorioiden tunnelointimikroskopiaista ja elektronispektroskopiaista suurten tutkimuskeskusten synktronisäteily- ja neutronisironnaimittauksiin.


Materiaalitutkimuksen kolmas kivijalka on *mallinnus ja simulointi*, laskennallinen materiaalfysiikka [2,3]. Tämä on Teknillisen korkeakoulun fysiikan laboratoriossa toimivan COMP-yksikön tutkimusalue. Laskennallinen fysiikka on esimerkki uudesta, laskennallisesta tieteentekotavasta.

Mitä on laskennallinen tiede?


Laskennallinen tiede pyrkii uuden tieteellisen tiedon tuottamiseen tehokkaiden tietokoneiden avulla. Siinä yhdistyvät matemaattiseen muotoon puettavien teorioiden kehitys, numeeristen algoritmien tutkimus ja soveltaminen sekä tietojenkäsittelytiede ja -tekniikka [4,5].

Tietokoneiden nopea kehitys on mahdollistanut yhä monimutkaisempien ongelmien ja järjestelmien tutkimuksen. Tyypillistä näille laskennallisen tutkimuksen kohteille on niitä kuvaavien yhtälöiden valtava muuttujien määrä, mallien epälineaarisuus sekä reunaehdojen monimutkaisuus. Tutkittavat järjestelmät ovat myös monitieteisiä siinä mielessä, että niiden kuvailussa tulee yhdistää monen perinteisen tieteenalan tietoa ja menetelmiä. Tyypillinen esimerkki on ilmastomallinnus, jossa yhdistyvät ilmakehän virtauksien monimutkainen fysiikka, ilmakehän kaasuerosten ja aerosolien kemialliset reaktiot auringon säteilykentässä, geomagnetismi ja valtamerien hydrologia ja oseanografia.


On olemassa kolmen kategorian tutkimuskohteita, joiden kannalta laskennallinen lähestymistapa on välttämätön. Ensimmäiseen kategoriaan kuuluvat sellaiset



tutkimusongelmat, joiden tieteelliset perusteet tunnetaan mutta joiden *monimutkaisuus* on niin suuri, että vain suurimittainen laskenta voi tuottaa käyttökelpoisia tuloksia, sekä mallien testaamisen että uusien tulosten ennustamisen kannalta. Sekä laskennallinen materiaalitiede että ilmastomallinnus ovat esimerkkejä tästä kategoriasta.




Toiseen kategoriaan kuuluvat *strategiset* ongelmat, joiden tieteelliset peruseriaatteet ymmärretään vain osin. Mallinnus, simulointi ja niihin liittyvä suurten tietoaisteojen käsittely ("tiedon louhinta") lisäävät vähitellen ymmärrystämme myös tutkittavien järjestelmien peruseriaateista. Tärkeä ja ajankohtainen esimerkki tällaisesta laskennallisen tieteen tutkimuskohteesta on erilaisten biologisten järjestelmien, kuten geneettisen aineiston tutkimus.




Kolmanteen kategoriaan kuuluvat *fundamentaaliset* ongelmat, joissa laskennallinen tutkimus voi auttaa luontoa kuvaavien matemaattisten struktuurien ymmärtämisessä. Tällaisia ongelmia ovat esimerkiksi maailmankaikkeuden syntyhetkiin liittyvä kosmologia, alkeishiukkasia kuvaavat kentäteoriat sekä voimakkaasti vuorovaikuttavien hiukkasjoukkojen kvanttimekaniikka.




Materiaalifysiikan kehityssuuntia




Materiaalifysiikan kenttä on laaja, ja lyhyessä esityksessä on mahdotonta antaa edes osin kattavaa kuvaa sen tulevasta kehityssuunnista. Seuraavassa on lyhyesti kuvattu eräitä tämän hetken kehitystrendejä.




Käytännön materiaalit: epäorgaanisista yhdisteistä proteiineihin




Tekniikan kannalta keskeisiä materiaaleja ovat mm. erilaiset keraamit, betonit, metalliseokset ja komposiitit. Monilla niiden tärkeistä ominaisuuksista on hyvin vähän tekemistä tutkimuslaboratorioissa käsiteltävien ideaalisten, tasapainotilassa olevien kidenäytteiden kanssa. Esimerkiksi teräksen väsyminen, betonin murtuminen tai monikiteisten metallien lämmön- ja sähkönjohtavuus määräytyvät ennen muuta niiden mesoskaalan rakenteesta, rakeista ja niiden välisistä rajoista, epäpuhtauksien erkautumista ja virhekertymistä. Paperi on myös oiva esimerkki monimutkaisesta käytännön materiaalista.




Tekniikan materiaalit ovat myös lähes poikkeuksetta epäjärjestyneitä. Niiden fysiikaalinen käyttäytyminen riippuu myös niiden historiasta. Esimerkiksi metallikappaleen monikiteinen rakenne riippuu yksityiskohtaisesti siitä, miten se on valettu ja miten sitä on muokattu työstövaiheessa. Monimittakaavaisuus heijastuu myös ratkaisevasti materiaalien ominaisuuksissa. Raerajojen liike materiaalia kuormitettaessa määräytyy nk. dislokaatioiden, viivamaisten kidevirheiden dynamiikasta. Dislokaatioiden väliset vuorovaikutukset ovat hyvin monimutkaisia ja määräytyvät vuorostaan yksittäisten atomien liikkeistä. Atomien diffuusio ei-ideaalisessa materiaalissa on puolestaan hyvin monimutkainen ja monimuotoinen prosessi, johon vaikuttavat mm. kidevirheiden (vakanssien) liike ja vuorovaikutukset epäpuhtauksien kanssa. Vain laajamittainen simulointi voi antaa selventävää tietoa näistä monen mittakaavan ilmiöistä.




Proteiinit ja muut biomolekyylit tarjoavat samankaltaisia haasteita. Molekyylibiologit jakavat heitä kiinnostavat rakenteet primäärisiin, sekundaarisiiin ja tertiäärisiin juuri sen pituuskaalan mukaan, millä rakenne on järjestynyt. Kunkin skaalan funktionaalinen toiminta riippuu yksityiskohtaisesti sitä alemman skaalan skaalojen dynamiikasta ja energetiikasta, aina yksittäisen, vettä sisältävässä ympäristössä hydratoituneen proteiinin rakenteen tasolle asti.



Johtavat ja valoa emittoivat polymeerit



Vuoden 2000 kemian Nobel-palkinto annettiin kolmelle tutkijalle (Alan Heeger, Alan MacDiarmid, Hideki Shirakawa), jotka avasivat tien sähköä johtavien muovien kehittämiseksi. Hiilivetyihin perustuvat johteet ja jopa suprajohteet ovat perusteellisesti ravistelleet perinteisiä, metalleihin perustuvia käsityksiä sähkönjohtavuudesta. Valoa emittoivien polymeerien kehitystyö saattaa olla vielä tätäkin tärkeämpi askel aivan uudenlaisten materiaalien käyttöönottoon sähkötekniisissä sovelluksissa.



Nanoputket ja fullereeni

Timantti ja grafiitti olivat pitkään ainoat hiilen tunnetut järjestyneet (kiteiset) esiintymismuodot. Fullereeni-molekyylillä, joka on jalkapallomainen 60:n hiiliatomin muodostama molekyyli, löydettiin vuonna 1985. Se avasi tien kokonaisuudelle hiilirakenteiden maailmalle: heksagonisista hiiliatomien "kanaverkoista" voidaan syntetisoida loputon määrä erilaisia kolmeulotteisia hiilmolekyylejä, palloja, putkia, rypäitä ja niiden yhdistelmiä. Näiden hiilirakenteiden ominaisuudet riippuvat sekä rakenteiden koosta että geometriasta. Kenties mielenkiintoisin ja teknologisesti potentiaalisin on hiiliputkien joukko. Hiiliverkosta kierretyt nanoputket ovat joko johtavia tai puolijohtavia niiden kiertosäteestä riippuen, mikä suo mahdollisuuden erilaisten transistorien ja kytkinelementtien konstruointiin nanometrien mittakaavassa. Myös nanoputkien mekaaniset ominaisuudet ovat hämmästyttävät. Niiden sovellusmahdollisuudet näyttävät varsin hyviltä ja monipuolisilta sekä digitaalelektronikassa että analogilaitteissa.

Magneto-resistivisyys ja magneetoelektronikka

Kiinteän aineen magnetismin edistysaskeleet jäävät helposti puolijohdeteknologian ja mikroelektronikan varjoon. Magneettisten materiaalien ja rakenteiden kehitystyö on kuitenkin

ollut vähintään yhtä näyttävää. Tästä ovat esimerkkejä vaikkapa tietokoneiden levymuistien kapasiteetin moninkertaistuminen tai uudet tehokkaat kestopagneetit. Vahva kehitystrendi on puolijohtavuuden ja magnetismin yhdistäminen mikroelektronisissa laitteissa. Magneto-resistivisyys tarkoittaa materiaalin sähkönjohtavuuden riippuvuutta ulkoisesta, ohjaavasta magneettikentästä. Uusien materiaalien myötä se on nopeasti löytänyt tiensä elektroniikan sovelluksiin, esimerkiksi nopeiden levy- ja magneettinauhamuistien lukupäihin.

Pehmeät materiaalit

Pehmeän tiiviin aineen fysiikka on kehittynyt viime vuosina valtavasti harppauksin. Tämä tutkimusalue kohdistuu materiaalien pehmeuteen ja juoksevuuteen, toisin sanoen makromolekyylien ja nestemäisten materiaalien fysiikkaan. Sen teknologinen merkitys näkyy esimerkiksi polymeerien ja muovien laajassa sovelluskäytössä sekä erilaisten nesteiden ja makromolekyylien sovelluksissa lääketieteessä. Pehmeän aineen materiaalfysiikalla on vahvat kytkennät biologiseen tutkimukseen.


Biomateriaalit ja biologiset systeemit

Materiaalfysiikan suurimpia tulevaisuuden haasteita on omalta osaltaan rakentaa siltoja biologisten materiaalien ja järjestelmien tutkimukseen. Fysikaalinen ajattelutapa ja erityisesti siihen liittyvä kvantitatiivinen mallinnus voivat antaa korvaamattoman panoksen monimutkaisten biosysteemien pitkäjänteisessä tutkimustyössä. Monet keskeiset biologian ilmiöt ovat jo nyt fysikaalisen tutkimuksen kohteena, kuten proteiini-DNA- ja proteiini-proteiini-vuorovaikutukset, proteiinien laskostuminen ja dynamiikka, molekyyläriset moottorit sekä useat solukalvon ilmiöt.

Laskennallisen materiaalfysiikan tulevaisuuden tutkimusteemoja


Laskennallisen fysiikan menetelmät voidaan karkeasti jakaa kahteen ryhmään, *deterministisiin* ja *stokastisiin*. Deterministisissä menetelmissä ratkaistaan numeerisesti, tietokoneen avulla, fysikaalista ilmiötä kuvaavaa osittaisdifferentiaaliyhtälöä, esimerkiksi elektronien kvanttilojoja kuvaavaa Schrödingerin yhtälöä tai nesteen virtausta kuvaavaa Navierin-Stokesin yhtälöä. Tehtävän vaikeus kasvaa nopeasti muuttujien määrän kasvaessa, epälineaarisuudesta ja hankalista geometrisista reunaehdoista johtuen. Stokastisissa menetelmissä käytetään hyväksi ilmiöiden tilastollista luonnetta ja niitä kuvaavan statistisen fysiikan vahvoja teoreettisia menetelmiä. Monimutkaisten ilmiöiden tarkastelu edellyttää monimuuttujaisen ja -ulotteisten jakautumien ("faasiavarouden") huolellista ja aikaavievää läpikäymistä.

Moderni tietokone on mielenkiintoinen, kunnioitusta herättävä




laite, jonka on tehnyt mahdolliseksi materiaalfysiikan pitkään jatkunut laantumaton kehitys. Tietokoneet ja niiden komponentit ovat nyt niin sofistikoituja, että uuden laitesukupolven kehittäminen on mahdollista vain käyttämällä täysipainoisesti hyväksi edellisen sukupolven laitteiden tehoa. Kuten edellä on todettu, seuraavan vuosikymmenen kuluessa kehitys johtaa todennäköisesti nykyistä n. tuhat kertaa tehokkaampien tietokoneiden ilmestymiseen markkinoille. Suurimmat moniprosessori-installaatiot pystyvät tuolloin n. 1 petaflop/s (10^{15} laskutoimitusta sekunnissa) suoritustehoon, ja henkilökohtaiset tietokoneemmekin lähentelevät teraflopin (10^{12} laskutoimitusta) sekuntinopeutta. Kehä sulkeutuu, kun toteamme, että uudet, tehokkaammat koneet mahdollistavat uudenlaisen fysiikan tutkimuksen. Minkälaista materiaalfysiikkaa näillä tulevaisuuden koneilla voisi tehdä? Seuraavassa esitän katsauksenomaisesti eräitä materiaalfysiikan tulevaisuudennäkymiä, erityisesti laskennallisen tutkimuksen näkökulmasta katsottuna.

Suurten, vuorovaikuttavien systeemien kvanttimekaaninen käyttäytyminen




Tämä tutkimus pyrkii selvittämään niitä emergenttejä, esiinpiirtyviä ilmiöitä, kun suuri joukko atomeja kootaan materiaaliksi. Emergentit ilmiöt tuovat mikromaailmaa hallitsevan kvanttimekaniikan omaan, makroskooppiseen kokemusmaailmaamme. Ajankohtaisia esimerkkejä ovat atomaaristen kaasujen Bose-Einstein-kondensaatio, korkean lämpötilan suprajohtavuus, kolossaalinen magnetoestisivisyys (CMR) sekä spinelektroniikka.

Epäjärjestyneiden systeemien hidas dynamiikka




Monet epäjärjestyneet systeemit (kuten lasimaiset materiaalit) ovat epätasapainotilassa. Ne etenevät hitaasti kohti tasapainotilaa erilaisten relaksaatioilmiöiden kautta. Kuten kirjoituksen alussa on todettu, näiden relaksaatioiden aikaskaalat vaihtelevat tavattomasti. Kokeellisissa mittauksissa nähtävät ilmiöt kattavat ainakin 15 kertalukua. Tietokonesimulaatioiden avulla voidaan nykyisin peittää vain kolme-neljä kertalukua. On varsin todennäköistä, että alkaneella vuosikymmenellä kertalukujen määrä voidaan ainakin kaksinkertaistaa ja siten saada aivan uudenlaista tietoa epätasapainoilmiöistä ja niiden skaalauslaeista. Tämän mahdollistaa ennen kaikkea algoritmikehitys, jonka avulla voidaan hitaammin tapahtuvien prosessien simulointia nopeuttaa erityisesti rinnakkaislaskennan kautta.

Yksi- ja kaksiulotteiset systeemit




Tähän alueeseen kuuluvat pintojen ja rajapintojen, ohutkalvojen, nanorypäiden, polymeeriketjujen ja muiden keinotekoisesti rakentuneiden materiaalien tutkimus. Näiden materiaalien tutkimustyö on tiiviissä yhteydessä teknologiseen kehitykseen mm. katalyyysissä ja näyttölaitteissa.

Kompleksiset materiaalit




Monimittakaavainen lähestymistapa on välttämätön pyrittäessä ymmärtämään kompleksisten käytännön materiaalien ominaisuuksia. Atomitason visualisointi ja simulointi tulee liittää meso- ja makrotason kuvaukseen, jotta todellisten eikä vain idealisoitujen mallimateriaalien ominaisuudet voidaan ymmärtää. Esimerkkejä tällaisista materiaaleista ovat monikomponenttiset magneetit ja suprajohteet, kuitumateriaalit ja -komposiitit sekä polymeeriseokset.

Sähköiset ja optiset signaalit




Elektronien ja fotonien materiaalfysiikka on informaatioteknologian perusta. Tietoliikennetekniikka vaatii yhä nopeampia, halvempia ja pienempiä laitteita - prosessoreita, kytkimiä, vahvistimia, johteita jne. Elektronisen ja optisen signaalinkäsittelyn rajapinta siirtyy yhä lähemmäksi itse prosessoreita. Uusien puolijohdemateriaalien ja -rakenteiden atomitason suunnittelu on informaatioteknologian kehityksen edellytys myös tulevaisuudessa.

Magnetismi ja suprajohtavuus




Magnetismi ja suprajohtavuus ovat fyysikaalisia ilmiöitä, joiden




teknologinen merkitys on valtava. Vaikka näiden ilmiöiden fysikaalinen perusluonteen selvittämisessä on edetty pitkälle, magnetismin ymmärtäminen on vielä epätäydellinen, eikä korkean lämpötilan suprajohtavuudelle ole olemassa tyydyttävää teoriaa. Magnetismin ja suprajohtavuuden yhteydet ovat puutteellisesti tunnetut. Tulevaisuuden haasteisiin kuuluvat myös yksi- ja kaksikulotteisten systeemien ja nanorakenteiden magnetismi.

Materiaalien synteesi ja prosessointi




Materiaalien synteesi on epäilemättä keskeinen tutkimusalue, jonka merkitys vain kasvaa esimerkiksi rakenteiden koon pienenytessä ja puhtausvaatimusten tiukentuessa. Erilaiset fysikaaliset ja kemialliset kasvatusmekaniikat sekä prosessointi esimerkiksi ionisuihkujen avulla ovat strategisessa asemassa uusien materiaalien kehitystyössä.

Epätasapainoilmiöt




Epätasapainotilan ilmiöitä ovat mm. murtumisprosessit, kitka, rajapintojen ja mikrorakenteen dynamiikka sekä esimerkiksi erilaisten muotojen ja kuvioiden esiin piirtyminen kasvu- ja faasimuutosprosesseissa. Näitä ilmiöitä ei kontrolloi mekaaninen ja terminen tasapaino, vaan monen mittakaavan prosessit. Pituus- ja aikaskaalojen yhdistäminen on edellytys sille, että voimme ymmärtää ja ennustaa esimerkiksi materiaalien kiinteytyemisessä tai nesteiden virtauksessa syntyvät monimutkaiset rakenteet.

Mikroelektronikka ja -mekaniikka




Puolijohdeteknologia ja mikroelektronikka on kehittänyt menetelmiä, joiden avulla voidaan teollisessa mittakaavassa prosessoida piitä ja sen johdannaisia siten, että rakenteiden kokoluokka on mikrometrin osia. Teknologia on pääosin planaariteknologiaa, toisin sanoen toiminnalliset rakenteet ovat kaksikulotteisia. Komponenttien toiminta perustuu piin puolijohdeominaisuuksiin. Mikroelektromekaniikassa (MEMS) käytetään hyväksi myös materiaalin muita edullisia ominaisuuksia, erityisesti esimerkiksi piin hyviä mekaanisia ja termisiä ominaisuuksia. Planaariteknologian osioita, kuten komponenttien litografiaa ja etsausta, voidaan hyödyntää myös kolmeulotteisena. Piikiekolle voidaan mikrometrin mittakaavassa työstää mekaanisia systeemeitä, kuten värähtelijöitä tai releitä. Näin voidaan valmistaa miniatyrisoituja, piisurulle integroitua anturipiirejä, esimerkiksi kiihtyvyyden, kosteuden tai lämpötilan mittauksiin. MEMS-rakenteiden hallittu suunnittelu ja toteutus edellyttää monifysikaalista mallintamista, jossa erilaisia fysikaalisia ilmiöitä (virtaukset, värähtelyt, sähkömagneettiikka) tulee voida käsitellä toisiinsa kytkettyinä.

Nanorakenteet



Nanoteknologia on siirtymässä *science fiction* -asteelta lähemmäksi todellisuutta. Se tekee mahdolliseksi rakentaa ja prosessoida materiaaleja atomi atomilta, joko sofistikoituja manipulointitekniikoita tai itseorganisoiuvia prosesseja käyttäen. Jälkimmäisten ideat ja mallit voidaan yhä useammin kopioida luonnossa tapahtuvista kemiallisista reaktioista tai biologisista prosesseista. Nanorakenteet tarjoavat periaatteessa ehtymättömän vapauden suunnitella niille halutut fysikaaliset ja kemialliset ominaisuudet. Koska niiden pituuskaala on atomistinen, kvanttimekaniikka määrää niiden ominaisuudet. Aivan uudenlaisia, makromaailmassa outoja ominaisuuksia on odotettavissa. Mallinnuksella, laskennalla ja simuloinnilla on ratkaiseva osa nanoteknologian kehittämisessä.

Elämää piin jälkeen - mitä on nanoelektronikka?



On selvää, että jossain vaiheessa, kenties 10-15 vuoden kuluttua, piitekniologia ja miniatyrisointi kohtaavat fysikaaliset rajansa. Vaikka litografiaa voidaan tarkentaa siirtymällä käyttämään ultravioletti- tai röntgenvaloa ja elektronisuihkuja, transistorit eivät enää toimi entiseen tapaan, kun viivanleveys lähestyy 10 nanometriä. Pienestä koosta johtuvat sähkökenttien voimakkuudet, komponenttien lämpeneminen,

materiaalille asetettavat laatuvaatimukset sekä kvanttimekaaniset ilmiöt (mm. tunneloituminen) tulevat vaikeiksi hallita. Voimmeko enää tuolloin jatkaa Mooren lakia?

Yksinkertaisin ratkaisu olisi tietysti löytää piitä korvaava materiaali, jonka avulla nykyisellä teknologiapolulla voitaisiin jatkaa. Lupaava ehdokas on esimerkiksi germanium-piiseos (SiGe), jossa elektronit liikkuvat nopeammin kuin piissä. Sama miniaturisointiaste siis tuottaisi nopeampia piirejä. Mutta uutta kasvupolkua ei tämäkään materiaali avaa.

Uusia polkuja etsitään fysikaalisen perustutkimuksen avulla nanometrien kokoisista atomistisista rakenteista. Nanofysiikka ja nanoteknologia ovat kuumia ja kiinnostavia tutkimuskohteita ympäri maailman. Laboratorio-olosuhteissa jopa yksittäisten atomien manipulointi ja komponenttien rakentaminen niistä on mahdollista. Rakenteiden ja komponenttien ominaisuuksia voidaan myös laskennallisesti ennustaa tarkasti. Syntykö tästä nanoelektronikka, joka avaa aivan uuden luvun ultratiteiden komponenttien ja tehokkaiden tietokoneiden rakentamisessa?

Nanoelektronikan komponentit voidaan karkeasti jakaa kahteen ryhmään, kvanttitransistoreiksi sekä molekyyläisiksi komponenteiksi. Ensimmäinen ryhmä perustuu samoihin materiaaleihin kuin nykyinen mikroelektronikka, mutta uusiin (kvantti-)ilmiöihin. Toinen ryhmä hyödyntää molekyyliä, joiden koot luonnostaan ovat nanometrialueella ja joita kenties voidaan käyttää uudenlaisina elektronisina kytkiminä.

Nanokomponenttien kehityksen tiellä on vielä paljon esteitä, ja on mahdotonta esittää luotettavia arvioita siitä, mitkä ideat lopulta kestävät ja milloin teknologia on kaupallisesti hyödynnettävissä. Puolijohdeisiin perustuvien nanokomponenttien tyypillisiä ongelmia tällä hetkellä ovat mm. suuret loisivirrat, suuri herkkyys syöttöjännitteille sekä vaikeus monistaa rakenteita luotettavasti. Kvantti-ilmiö- ja yksielektronitransistorit (joita tutkitaan myös intensiivisesti mm. Teknillisessä korkeakoulussa Otaniemessä) toimivat yleensä luotettavasti vain matalissa lämpötiloissa, yli sadan asteen pakkasessa. Materiaalit tuottavat myös ongelmia. Piin oksidi on itse asiassa nanokomponenteissa hankaloittava tekijä, sillä se on yleensä amorfinen ja siksi liian "rosoinen" nanometrien mittakaavassa.

Molekyylärisen elektronikan tutkimusta on vauhdittanut lukuisien atomiskaalan manipulointimenetelmien nopea kehitys. Tunnelointimikroskopia (STM), atomivoimamikroskopia (AFM) sekä erilaiset kemialliset tekniikat mahdollistavat yksittäisten molekyylien järjestelyn. Orgaanisperäisistä molekyyleistä voidaan koota monenlaisia kytkimiä, releitä ja vahvistimia. Vaikka yksittäiset "molekyylilytkimet" eivät välttämättä ole äärimmäisen nopeita, ne voidaan periaatteessa pakata tiiviisti jopa kolmessa ulottuvuudessa ja siten saavuttaa haluttu lopputulos. Tutkimus- ja kehitystyö on kuitenkin vielä alkutaipaleella.

Optimistisen arvion mukaan nanoelektronikka mahdollistaisi aluksi 100-1000-kertaisen, lopulta jopa 100 000-kertaisen logiikkapiirin tiheyden lisäyksen nykyisiin verrattuina. Todennäköistä on, että tämä edellyttää kuitenkin aivan uudenlaisten arkkitehtuuriratkaisujen kehittämistä : kvanttipisteisiin perustuvia soluautomaatteja tai jotain sellaista, jota emme ole vielä tulleet ajatelleeksikaan. Perustutkimus on hyvässä vauhdissa, mutta laajamittaiset kaupalliset sovellukset ovat vielä ainakin parin vuosikymmenen päässä.

Anturit - seuraava aalto

Laajentakaamme tarkastelukulmaa ohi mikroprosessorien ja muistipiirien, jotka 1980-luvulla osoittivat tietojenkäsittelyn kumouksen suunnan. 1990-luvulla ilmestyi toinen uusia mahdollisuuksia avaava teknologia, halvat ja monipuoliset puolijohdelaserit. Nekin ovat hivuttaneet jokapäiväiseen ympäristöömme mm. CD-soittimina, romppuina ja optisina tietoliikenneyhteyksinä. Internetiä ja World Wide Webiä ei olisi olemassa ilman puolijohdelasereita. Samalla kun Internet ja WWW fragmentoituvat yhä enemmän ja kehittyvät kaaottisesta informaatiolähteestä erilaisten yhteisöjen kommunikaatiovälineeksi, seuraava uusi teknologia näkyy jo kulman takana: mikrosähköiset ja -mekaaniset anturit. Niiden avulla voimme lisätä tietotekniisiin laitteisiimme uusia aisteja, antaa niille mahdollisuuden nähdä, kuulla, tuntea, kenties jopa haistaa ja maistaa. Pietosähköiset ohjaimet, valoilmaisimet, "kaasuhaistimet", autojen jarruja ja ilmatyynyjä ohjaavat mikromekaaniset kiihtyvyyssanturit, GPS-paikantimet sekä

monet muut sovellukset ovat esimerkkejä mahdollisuuksista, joita modernit anturi- ja sensorimateriaalit jo nyt tarjoavat. Ne tulevat antamaan mahdollisuuden kytkeä toisiinsa meitä ympäröivä todellinen analogiamaailma yhtäältä sekä tietokoneiden ja -verkkojen digitaalinen maailma toisaalta.

Tietokoneet toimivat digitaalisessa maailmassa ja manipuloivat sitä, mutta ovat vielä vain harvoin suoraan tietoisia meidän analogiamaailmastamme. Anturit, sensorit ja aktuaattorit, yhdessä laserien ja mikroprosessorien kanssa tulevat radikaalisti muuttamaan tämän. Analogisen ja digitaalisen ero hämärtyy. On varsin mahdollista, että pitkällä aikavälillä - kenties 50 vuoden kuluttua - tietoteknologia perustuu taas täysin analogisiin komponentteihin, digitaalitekniikan näytellessä vain sivuosaa.

*

1900- ja 2000-lukujen taite jää ihmiskunnan teknologian historiaan käännteentekevän muutoksen ja ennakkoluulottomien innovaatioiden aikana. Viiden vuosikymmenen aikana tietokoneiden laskentateho on kasvanut kymmenmiljardiskertaiseksi, ja kasvuvauhti jatkunee nykyisenä ainakin vielä 15-20 vuotta. Tietoliikennetekniikka kietoo maapallon optiseen kuituun, ja langattomat yhteydet ulottuvat kaikkialle. Horisontissa on esimerkiksi tietokone, jossa miljardi transistoria käsittävä systeemi (prosessorit + muistit) on integroitu yhdelle puolijohdesirulle. Tehokkaat algoritmit ja ohjelmointi tekevät laitteesta todellisen henkilökohtaisen avustajamme. Se voidaan langattomasti liittää globaaliin tietoverkkoon, jossa käytössä on älykkäiden tietokantojen arsenaali. Yhdistämällä tehokas digitaalinen prosessointi uuteen analogiseen tekniikkaan voidaan edelleen rakentaa laitteita, jotka ymmärtävät puhetta, näkevät, kuulevat ja tallettavat kaiken kokemansa teratavujen suuruiseen muistiinsa.

Tässä kehityksessä avainasemassa on materiaalitutkimus, jonka keskeinen osa-alue laskennallinen materiaalfysiikka on. Sen menetelmät ja tulokset ulottuvat laajalle, yhä enemmän myös elävän luonnon ja biomateriaalien suuntaan.

Voimme vielä pitkään luottaa teknologian kykyyn tuottaa alati paranevia edellytyksiä elämän laadun ja ympäristön tilan ylläpitämiseksi ja kohentamiseksi. Eri asia on, osaammeko näitä edellytyksiä käyttää oikein ja millaisia yhteiskunnallisia ja sosiaalisia vaikutuksia tällä uskomattomalla kehityksellä lopulta tulee olemaan.

VIITTEET

[1] P.W. Anderson: *More is different*, *Science* 177, 393 (1972).

[2] *Computational Materials Science*, toim. R. LeSar ja R.M. Nieminen, Elsevier Science, Amsterdam (1992 - 2000).

[3] J. Bernholc: *Computational materials science - the era of applied quantum mechanics*, *Physics Today*, September 1999, 325.

[4] Risto M. Nieminen: *From number crunching to virtual reality: mathematics, physics and computation*, kirjassa *Mathematics Unlimited-2001 and Beyond*, toim. B. Engquist ja W. Schmid, Springer-Verlag, Heidelberg (2000).

[5] N. Gershenfeld: *The Nature of Mathematical Modeling*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (1999).

Kirjoittaja on akatemiaprofessori Teknillisen korkeakoulun Fysiikan laboratorion laskennallisen materiaalfysiikan tutkimusyksikössä.