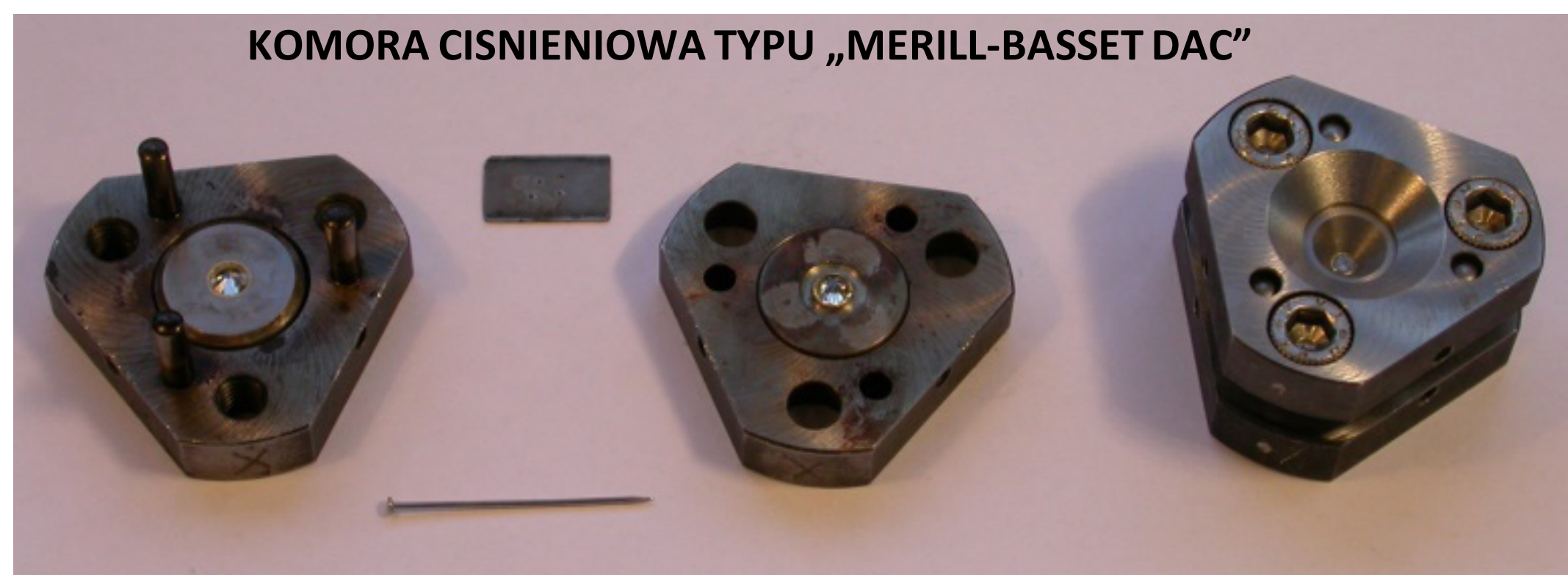


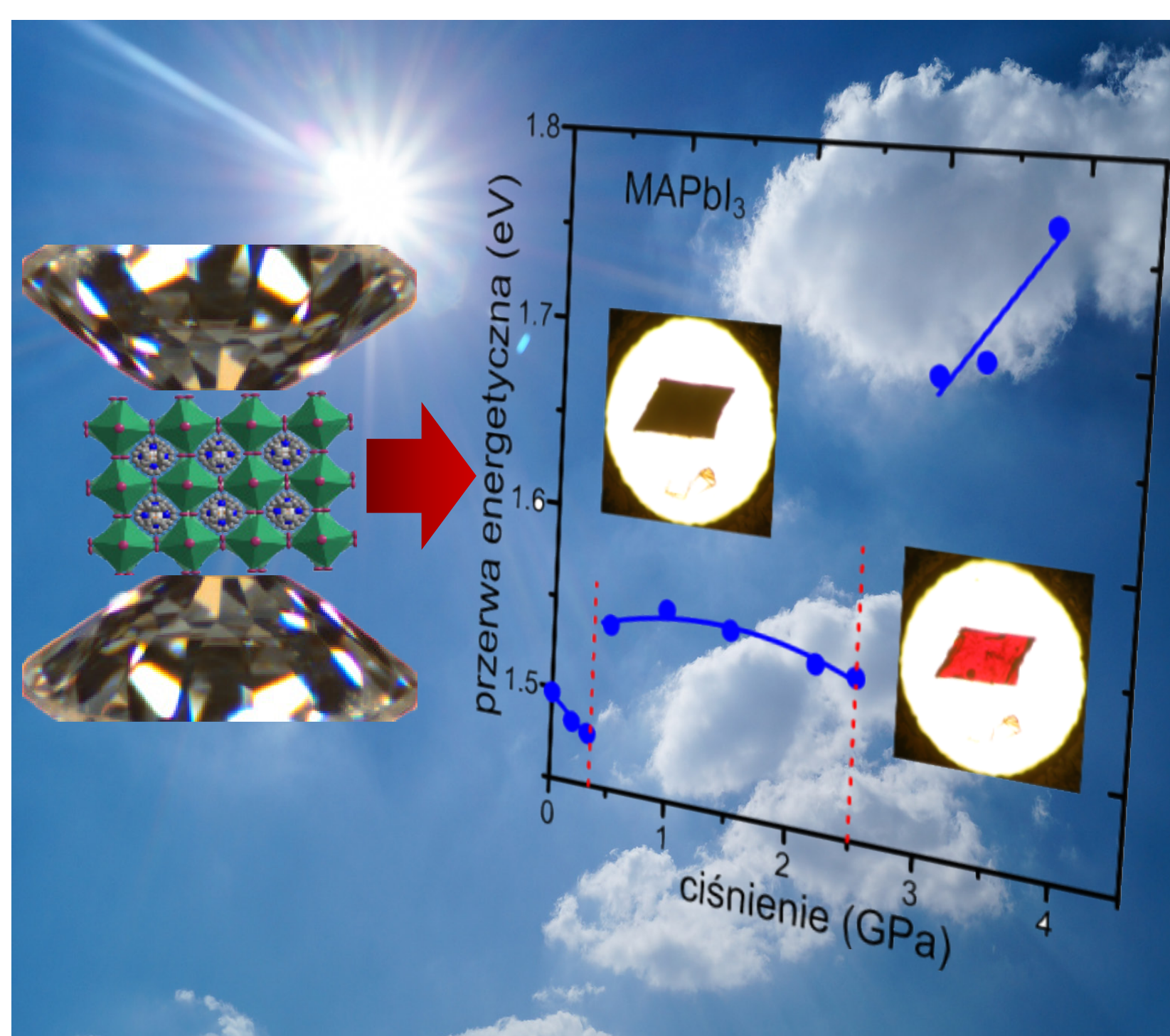
WYSOKIE CIŚNIENIE

Badania materiałów w warunkach ekstremalnych pozwalają na wgląd w serca planet i lepsze zrozumienie procesów tam zachodzących. W szczególności, zastosowanie wysokich ciśnień przyniosło odkrycie spektakularnych zmian własności fizycznych i chemicznych nawet w najprostszych materiałach. Ponadto badania w wysokich ciśnieniach pozwoliły na opracowanie nowych technologii opartych na wysokociśnieniowej syntezie i obróbce czego przykładem są materiały o wyjątkowej twardości, czy substancje w stanie amorficznym. Techniki wysokociśnieniowe zostały zrewolucjonizowane poprzez zastosowanie komory diamentowej (DAC), które pozwalają uzyskiwać w laboratorium ciśnienia nawet do kilkuset GPa.



TEMATYKA BADAWCZA

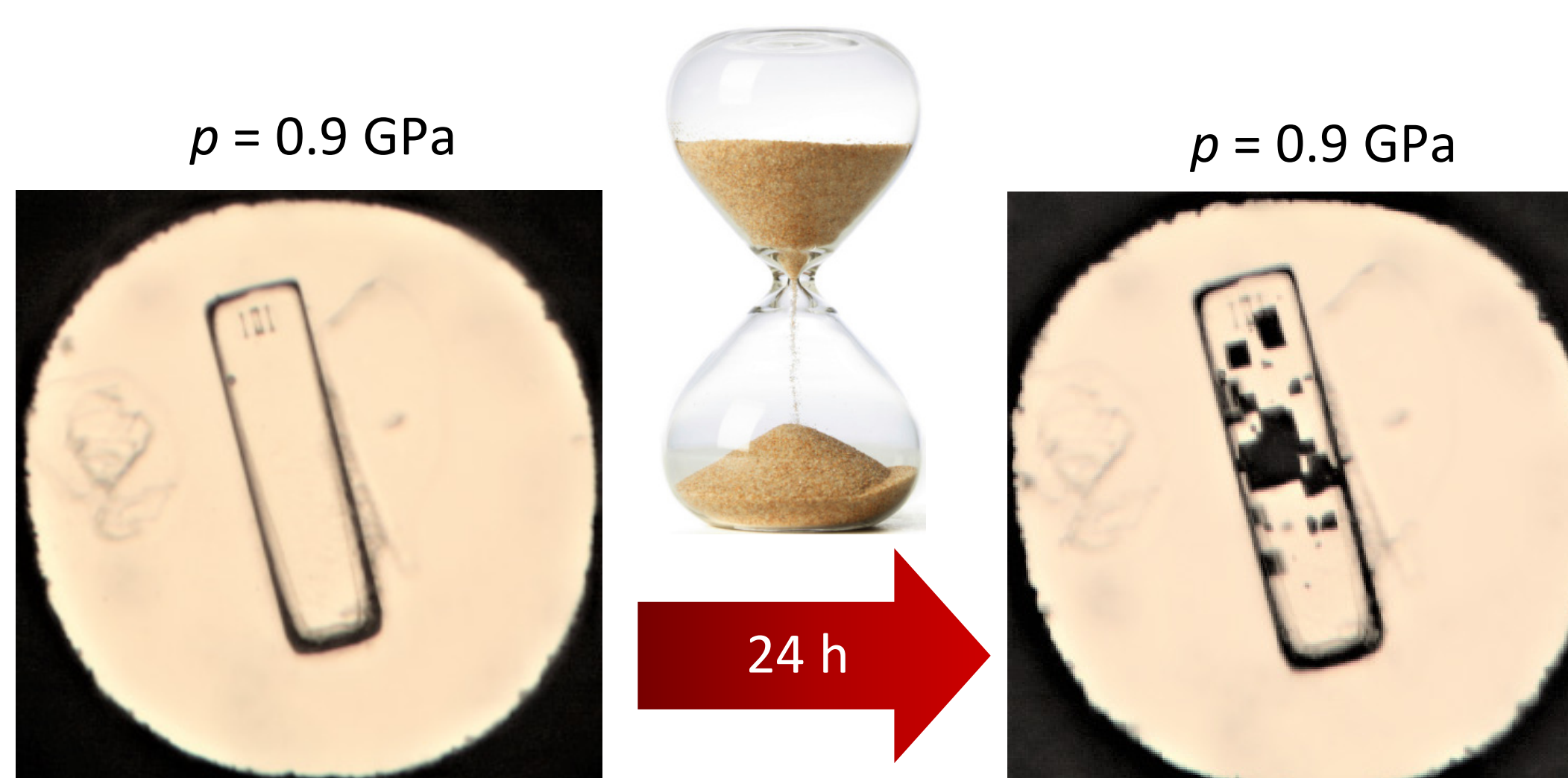
Nasze aktualne zainteresowania skupione są na badaniu organiczno-nieorganicznych halogenków perowskitowych o ogólnym wzorze ABX_3 ($A = CH_3NH_3^+$ (MA) lub $NH_2CH=NH_2^+$ (FA), $B = Pb^{2+}, Sn^{2+}, Ge^{2+}$, oraz $X = Cl^-, Br^-, I^-$), które pojawiły się ostatnio jako wysoce wydajne absorbenty dla przetwarzania energii słonecznej i innych zastosowań optoelektronicznych. Struktury krystaliczne hybrydowych perowskitów utworzone są z połączonych narożami oktaedrów BX_6 i organicznych kationów zajmujących luki utworzone pomiędzy oktaedrami. Wiązania $B-X-B$ są współliniowe albo zgięte w zależności od symetrii kryształu. Poprzez przyłożenie wysokiego ciśnienia można modyfikować długości wiązań i kąty walencyjne bez ingerencji chemicznej, zmieniając strukturę elektronową odpowiedzialną za podstawowe własności materiałów fotowoltaicznych takie jak przerwa energetyczna, czy droga dyfuzji nośników prądu. Głównym celem naszych badań są relacje pomiędzy parametrami strukturalnymi i fotowoltaiczną aktywnością materiałów. Wysokociśnieniowe badania strukturalne, prowadzone metodą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na monokryształach oraz na próbkach polikrystalicznych, skorelowane są z badaniami przesunięcia krawędzi absorpcji oraz z obserwacjami mikroskopowymi.



STRUKTURA A PRZERWA ENERGETYCZNA

W hybrydowych perowskitach pod wpływem ciśnienia szkielet nieorganiczny jest modyfikowany w wyniku skracania wiązań $B-X$ i/lub poprzez zginanie fragmentów $B-X-B$ sprzężone z rotacjami oktaedrów BX_6 . Skracanie wiązań $B-X$ skutkuje zmniejszeniem przerwy energetycznej, natomiast zginanie $B-X-B$ prowadzi do jej zwiększenia. Obserwowane w zakresie niewielkich ciśnień zmniejszanie przerwy energetycznej poszerza zakres spektralny absorpcji energii słonecznej, co polepsza własności fotowoltaiczne materiału. W wyższych ciśnieniach występuje efekt odwrotny skutkujący spektakularną zmianą barwy kryształu. Ponadto, w tych materiałach zachodzą indukowane ciśnieniem przemiany fazowe i amorfizacja, które powodują drastyczne zmiany strukturalne skorelowane ze zmianami własności fotowoltaicznych. Szczególnie istotne, zwłaszcza z technologicznego punktu widzenia, są nowo odkryte efekty kinetyczne, gdzie transformacje strukturalne pod wpływem ciśnienia zachodzą bardzo powoli w przeciągu dni, tygodni, a nawet miesięcy.

KINETYKA PRZEMIAN



M. Szafrński, A. Katrusiak, Mechanism of pressure-induced phase transitions, amorphization, and absorption-edge shift in photovoltaic methylammonium lead iodide. *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 3458–3466 (2016).

M. Szafrński, A. Katrusiak, Photovoltaic hybrid perovskites under pressure. *J. Phys. Chem. Lett.* **8**, 2496–2506 (2017).