

Bezołowiowe stabilne materiały organiczno-nieorganiczne o zwiększonej wydajności fotokonwersji do zastosowań w ogniwach słonecznych i fotodetektorach

Mając na uwadze ograniczone zasoby paliw nieodnawialnych na świecie poszukuje się innych sposobów wytwarzania energii elektrycznej niż te przy ich użyciu. Jedną z możliwości jest konwersja energii słonecznej na prąd elektryczny. W urządzeniach przetwarzających fotony na elektrony płynące w obwodzie elektrycznym konieczne jest użycie materiałów o określonych właściwościach. Przede wszystkim muszą to być półprzewodniki o przerwie energetycznej w modelu pasmowym odpowiadającej energii padających fotonów (1 – 3 eV). Nie jest to warunek wystarczający. Aby uzyskać jak najwyższą wydajność fotokonwersji, w półprzewodniku musi istnieć odpowiednia liczba elektronów, które mogą ulec wzbudzeniu do pasma przewodnictwa. Innymi słowy musi istnieć odpowiednia liczba poziomów energetycznych dla elektronów w pobliżu maksimum pasma walencyjnego i minimum pasma przewodzenia. W nomenklaturze modelu pasmowego nazywa się to gęstością stanów. Idealny materiał na warstwę aktywną w przyrządzie elektronicznym do fotokonwersji, oprócz wyżej wymienionych cech, musi się charakteryzować dużą ruchliwością nośników prądu (elektronów i dziur) oraz ich długą drogą swobodną. Kolejną trudnością, którą trzeba pokonać przy wytwarzaniu odpowiedniego materiału do fotokonwersji jest fakt, że powstający ekscyton (para elektron-dziura) szybko ulega rekombinacji. A więc para elektron-dziura musi ulec szybkiemu rozdzieleniu, aby potem brać udział w przepływie prądu. Kluczową sprawą jest wielkość energii wiążącej w ekscytonie, powinna być ona niezbyt duża. Ponadto warunkiem rozdzielenia elektronu i dziury jest obecność pola elektrycznego. Pole elektryczne może być wytworzone poprzez zastosowanie półprzewodników typu *p* i *n*, odpowiednio po jednej i po drugiej stronie warstwy aktywnej. Inną opcją jest zastosowanie materiału ferroelektrycznego z wbudowaną polaryzacją spontaniczną (ładunek dodatni i ujemny pojawia się po przeciwnych stronach warstwy aktywnej). Kolejnym problemem jest dobór metali na kontakty elektryczne. Z jednej strony metal powinien charakteryzować się dobrą adhezją do warstwy półprzewodnikowej. Z drugiej strony praca wyjścia elektronu z metalu powinna zapewniać kontakt omowy, ponieważ czasem zdarza się, że tworzy się bariera energetyczna dla elektronów (tzw. bariera Schottky'ego), która uniemożliwia ich przepływ. Wszystkie te wymagania stawiane materiałom na warstwy aktywne w urządzeniach do fotokonwersji spowodowały, że postanowiliśmy zająć się systematycznymi poszukiwaniami tego typu materiałów w obiecującej grupie hybryd organiczno-nieorganicznych (OIH). Materiały te należą do szeroko rozumianych perowskitów, do których należy najbardziej znany ich przedstawiciel $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbI}_3$. Niestety ten ostatni jest toksyczny ze względu na zawartość ołowiu i jest niestabilny na powietrzu. Wiadomo, że zastosowanie innego metalu, halogenu i cząsteczki organicznej pozwala na modyfikację szerokości pasma wzbronionego i koncentracji nośników oraz na zwiększenie stabilności. A poprzez zastosowanie odpowiednich kationów organicznych (np. zawierających π -sprzężone elektrony) można wygenerować odpowiednie ścieżki przewodzenia dla elektronów. W ten sposób spodziewamy się otrzymać materiał o dużej stabilności na powietrzu, półprzewodzący, o dobrej szerokości pasma zabronionego i odpowiedniej dla komercjalizacji wydajności konwersji fotonów na prąd elektryczny. Nasze badania będą obejmować określenie struktury krystalicznej materiału. Istotne jest na przykład określenie wymiarowości sieci anionowej – 3D, 2D, 1D lub 0D. Oczywiście najkorzystniejsza z punktu widzenia przewodnictwa jest sieć trójwymiarowa (3D), ale należy się spodziewać, że zastosowanie odpowiednich kationów organicznych umożliwi lepsze przewodzenie prądu również w strukturach o niższej wymiarowości. Oczywiście istotne będzie określenie parametrów półprzewodnikowych: szerokości pasma zabronionego, gęstości stanów, ruchliwości nośników prądu i ich drogi swobodnej. Wielkości te mogą być określone na drodze eksperymentalnej, ale także na drodze obliczeń teoretycznych. Określenie tych wielkości w szerokim zakresie temperatur pozwoli na opisanie przydatności otrzymanych materiałów do zastosowania w przyrządach elektronicznych (fotodetektorach, ogniwach fotowoltaicznych, diodach *p-i-n* itp.) Proponowane badania w ramach projektu należą do aktualnych światowych trendów badawczych i otwierają nowe perspektywy oraz możliwości w syntezie i charakteryzacji perowskitów opartych na hybrydach organiczno-nieorganicznych. W rezultacie otrzymane wyniki dostarczą nowych wskazówek dotyczących wytwarzania stabilnych i wydajnych fotodetektorów.

