

Projekt 6.1 Efekty ekscytonowe w perowskitach dla celów fotowoltaicznych i laserowych

Promotor: dr hab. Małgorzata Wierzbowska, prof. IWC PAN

Pracownia: Krystalizacji (NL3)

www:

https://scholar.google.pl/citations?hl=pl&user=Vk_Z3dQAAAAJ&view_op=list_works&sortby=pubdate

<http://www.unipress.waw.pl/~wierzbowska/>

Opis

Perowskity ABX_3 (A=metylammonium,formamidinium,Cs,Rb B=Pb,Sn X=Cl,Br,I) oraz ich struktury niskowymiarowe (2D, nanodruły, kropki kwantowe) i heterostruktury z warstwami organicznymi nieustannie zyskują popularność jako materiały fotowoltaiczne i optoelektroniczne (diody, lasery, detektory). Od 2014 roku, optycznie pompowane lasery perowskitowe, zarówno impulsowe jak i ciągłe, są publikowane. Jednakże, do tej pory nie udało się skonstruować lasera pompowanego elektrycznie, co jest naszym celem. Energie wiązania ekscytonów w tych materiałach są w granicach 25-400 meV, zapewne to nie jest rekord. Dzięki wysokiemu współczynnikowi odbicia światła (2.2-2.5) na granicy perowskit-powietrze, naturalne wnęki nanocząstek nie wymagają luster. Ponadto, zintegrowany system perowskitowy z warstwą aktywną optycznie oraz lustrami topologicznymi mógłby być otrzymany w celu zbudowania lasera polarytonowego.

Dokładne policzenie interesujących własności jest możliwe w ramach formalizmu funkcji Green'a, z równania Bethe-Salpeter (program Yambo), z funkcjami i energiami własnymi Hamiltonianu pola średniego otrzymanego w ramach DFT (program Quantum-Espresso) użytymi jako parametry wejściowe do konstrukcji nieoddziałującej funkcji Green'a i operatora energii własnej.

Cel projektu:

Celem projektu jest zdobycie biegłości w posługiwaniu się narzędziami komputerowymi do otrzymywania własności ekscytonowych materiałów, zrozumienie mechanizmów silnego (dla laserów) lub słabego (dla baterii słonecznych) parowania elektron-dziura i związanie tych mechanizmów ze strukturami geometrycznymi i chemicznymi perowskitów. Laser perowskitowy pompowany elektrycznie będzie zaproponowany teoretycznie i zbudowany we współpracujących grupach doświadczalnych.

Wymagania:

- kandydat/ka powinien/powinna mieć skończone studia magisterskie w jednej z dziedzin: fizyka, chemia, informatyka lub kierunków pokrewnych i silną motywację do rachunków materiałowych oraz zręczność w posługiwaniu się środowiskiem linux,
- dobra znajomość języka angielskiego jest bardzo przydatna,
- szukamy kandydatów znających przynajmniej jeden język programowania komputerowego.