สมบัติเชิงโครงสร้างและเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของเมทิลแอมโมเนียมเลดไอโอไดด์เพอรอฟสไกต์ภายใต้ความดันสูง

เป้าหมายของโครงการ
ศึกษาการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างของผลึกและพิจารณาแนวโน้มของสมบัติเชิงกายภาพที่มีการเปลี่ยนแปลงภายใต้สภาวะรุนแรงในโลหะไฮไดรด์และเซลล์สุริยะตระกูล Perovskite

งบประมาณ
779,600.00 (เจ็ดแสนเจ็ดหมื่นเก้าพันหกร้อยบาทถ้วน)

ระยะเวลาดำเนินการวิจัย
3 ปี นับตั้งแต่ 16 มี.ค. 2560 – 15 มี.ค. 2563

ความสอดคล้อง
เป็นการพัฒนาเทคโนโลยีของเซลล์สุริยะ ซึ่งเป็นทิศทางที่สำคัญของประเทศในการเพิ่มศักยภาพ และส่งเสริมความมั่นคงทางพลังงานโดยการพัฒนาเทคโนโลยีขึ้นเองภายในประเทศ

หัวหน้าโครงการ รองศาสตราจารย์ ดร.อุดมศิลป์ ปิ่นสุข[1]
เบอร์โทรศัพท์: 0-2218-5104
โทรสาร: 0-2253-1150
E-mail: pinsook@gmail.com

คณะนักวิจัย รองศาสตราจารย์ ดร.ธิติ บวรรัตนารักษ์[1]
รองศาสตราจารย์ ดร. นคร ไพศาลกิตติสกุล[1]
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ประยุรศักดิ์ เปลื้องผล[2]

[1]ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
[2]ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยหัวเฉียวเฉลิมพระเกียรติ

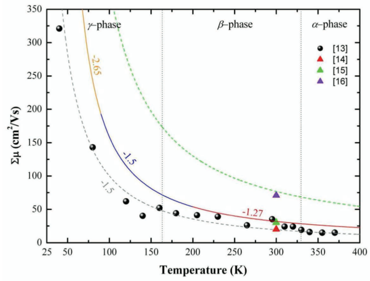
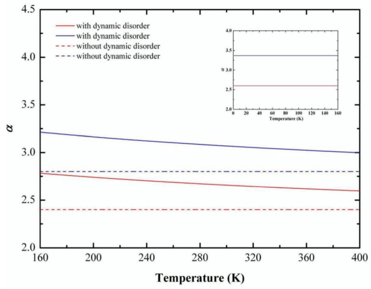
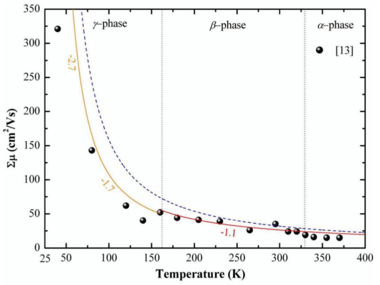
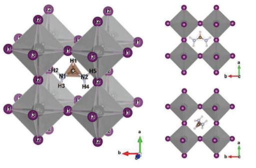
ประสิทธิผล
- นิสิต ป.เอก 1
- นิสิต ป.โท 1
- บทความตีพิมพ์ในวารสารนานาชาติ 8

ผลกระทบ
เป็นการสร้างความเป็นเลิศทางวิชาการโดยเฉพาะอย่างยิ่งในการศึกษาวิจัยเชิงทฤษฎี

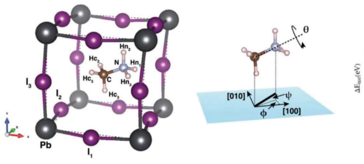
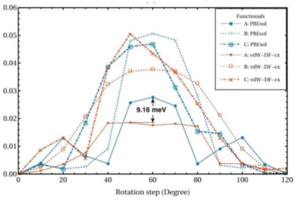
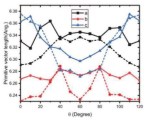
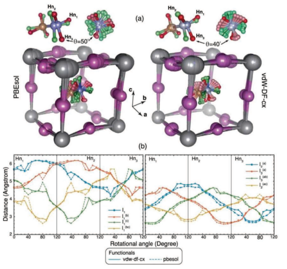
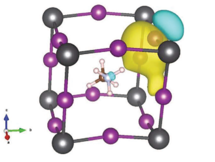
ความยั่งยืน
วางรากฐานความเข้มแข็งของฟิสิกส์ทฤษฎีในประเทศ ให้สามารถร่วมพัฒนาเทคโนโลยีที่จำเป็นของประเทศได้อย่างยั่งยืน

ผลการดำเนินงาน

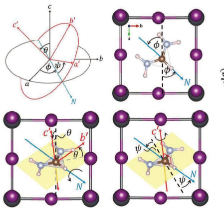
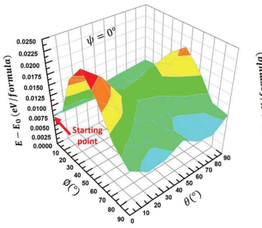
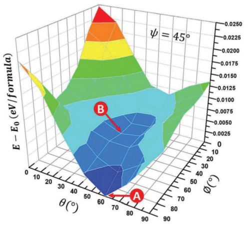
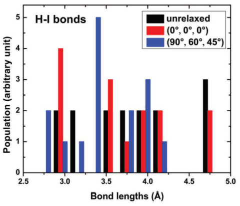
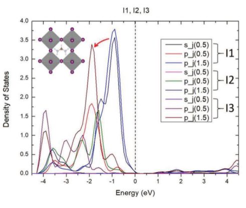
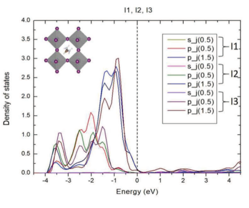
การขนส่งของโพลารอนในเพอรอฟสไกต์ลูกผสม $CH_3NH_3PbI_3$ (MAPI) [1]: การเคลื่อนย้ายที่ขึ้นกับอุณหภูมิได้ถูกศึกษาและได้แสดงให้เห็นถึงความสัมพันธ์ระหว่างการกระเจิงตามยาวของโพลารอนกับ power law mobility

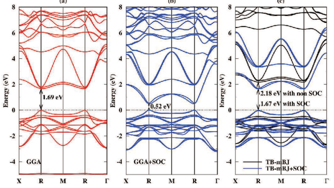
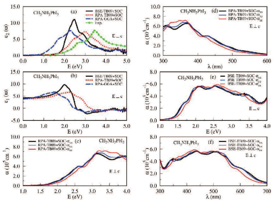
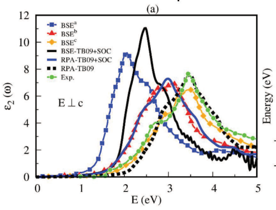
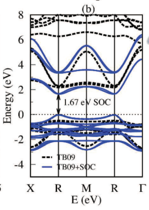
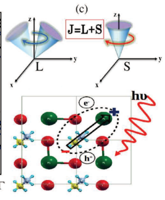
ผลของแรงแวนเดอร์วาลส์ใน $CH_3NH_3PbI_3$ (MAPI) [2]: โครงสร้างผลึกรวมทั้งโมเลกุลอินทรีย์ได้ถูกปล่อยให้มีการผ่อนคลายทุกครั้งที่มีการหมุนแบบวัตถุแข็งเกร็งของโมเลกุลอินทรีย์ เสถียรภาพเชิงพลังงานได้ถูกวิเคราะห์ผ่านตัวแปรเชิงโครงสร้างอย่างละเอียด ส่วนกำแพงเชิงพลังงานได้แสดงให้เห็นถึงข้อจำกัดในการเรียงตัวของโมเลกุลอินทรีย์

ผลจากการวางตัวของโมเลกุลอินทรีย์ใน $CH_3NH_3PbI_3$ (MAPI) [3]: การประยุกต์โดยนำมุมของออยเลอร์มาใช้ในการหมุนโมเลกุลอินทรีย์แบบวัตถุแข็งเกร็งได้ถูกศึกษาโดยละเอียดถึงสมบัติเชิงพลังงานของ MAPI เช่นเดียวกับสมบัติเชิงอิเล็กทรอนิกส์ของการวางตัวที่มีเสถียรภาพสัมพัทธ์เชิงพลังงานของทั้งสองรูปแบบ ที่น่าสนใจคือปรากฏการณ์ที่เรียกว่า Rashba effect เกิดขึ้นกับกรณีที่โมเลกุลเรียงตัวแบบเสียสมมาตร

การศึกษาธรรมชาติของ exciton ที่มีผลต่อการตอบสนองเชิงแสงของ $CH_3NH_3PbI_3$ (MAPI): วิธีการคำนวณที่ได้รวมพฤติกรรมของ excitons ได้ถูกนำเสนอผ่านสมการ Bethe-Salpeter (BSE) ผลที่ได้มีความแม่นยำเมื่อเทียบกับการทดลอง ซึ่งงานนี้ ของ lattice polarizability ได้ถูกเสนอแนะถึงความเป็นไปได้ของการมีตัวตนในระบบที่มีความซับซ้อนอย่าง MAPI

[1] Thongnum, Anusit, and Udomsilp Pinsook. "Polaron Transport in Hybrid $CH_3NH_3PbI_3$ Perovskite Thin Films." *Nanoscale* (2020).
[2] Klinkla, Rakchat, et al. "The crucial role of density functional nonlocality and on-axis CH 3 NH 3 rotation induced I 2 formation in hybrid organic-inorganic CH 3 NH 3 PbI 3 cubic perovskite." *Scientific reports* 8.1 (2018): 1-9.
[3] Sukmas, Wiwittawin, et al. "Organic Molecule Orientations and Rashba-Dresselhaus Effect in α-Formamidinium Lead Iodide." *The Journal of Physical Chemistry C* 123.27 (2019): 16508-16515.
[4] Manuscript

โปสเตอร์สรุปโครงการวิจัย 2560
การประชุมศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ ประจำปี 2563
ณ โรงแรม เดอะ สุโกศล กรุงเทพมหานคร วันที่ 28 สิงหาคม พ.ศ. 2563

ThEP
http://thep-center.org/