

Nauki fizyczne temat nr 7	Physical sciences topic No. 7
Geometria a przenikalność elektryczna: badanie dynamiki przejść fazowych pierwszego rodzaju w przełączalnych dielektrykach	Geometry vs. Dielectric Permittivity: Exploring First-Order Phase Transition Dynamics in Switchable Dielectrics
PhD supervisor: prof. dr hab. Sebastian Pawlus	
<p>Krótką charakterystyka założeń i celów badawczych</p> <p>Materiały dielektryczne zdolne do zmiany swoich właściwości w wyniku przejścia fazowego, czyli do „przełączania” (ang. switching), mają liczne potencjalne zastosowania. Mogą zmieniać przenikalność elektryczną lub rezystywność między stanami o odmiennej strukturze krystalicznej lub stopniu uporządkowania molekularnego pod wpływem różnych bodźców zewnętrznych. Przykładem są optyczne materiały przełączające, w których po „przełączeniu” pojawia się generacja drugiej harmonicznej (SHG). Przechodzą one od stanu SHG-OFF do SHG-ON w odpowiedzi na zmianę warunków, co jest związane z dynamiką kationów organicznych w klatkach molekularnych oraz zmianą ich symetrii w trakcie przejścia fazowego pierwszego rodzaju. Dzięki temu mogą być stosowane w przełącznikach, czujnikach oraz innych elementach optoelektronicznych reagujących szybką zmianą parametrów na bodźce takie jak temperatura czy światło.</p> <p>Coraz większe zainteresowanie budzą materiały dielektryczne, w których przejście fazowe powoduje skokową zmianę przenikalności elektrycznej. Zdolność ta znacząco rozszerza ich możliwości aplikacyjne w elektronice. Nadal jednak niewiele wiadomo o samym mechanizmie „przełączania”, jego przyczynach oraz roli, jaką odgrywa naprężenie mechaniczne, np. ciśnienie hydrostatyczne. Szczególnie istotne jest to w</p>	<p>Brief description of research assumptions and goals</p> <p>Dielectric materials capable of altering their properties through a phase transition—thus enabling “switching”—have a wide range of potential applications. They can change their electric permittivity or resistivity between states with different crystal structures or degrees of molecular order in response to external stimuli.</p> <p>A notable example is optical switching materials in which second-harmonic generation (SHG) occurs after the transition. Such materials switch between SHG-OFF and SHG-ON states depending on external conditions. This behavior is linked to the dynamics of organic cations confined within molecular cages and to symmetry changes that occur during a first-order phase transition. These features make them promising for optoelectronic devices such as switches and sensors that react with a rapid change of parameters to variations in temperature or light intensity.</p> <p>Recently, increasing attention has been devoted to dielectric materials in which a first-order phase transition induces a sharp change in electric permittivity. This switching ability greatly expands their potential in electronic applications. However, the mechanism behind dielectric switching is still not well understood, particularly the influence of mechanical stress such as hydrostatic pressure. This issue becomes especially important in thin-</p>



cienkich warstwach, gdzie naturalnie powstają naprężenia wynikające choćby ze zmian temperatury.

Materiały te muszą spełniać szereg kryteriów: powinny być możliwe do syntezy również w formie cienkich warstw, prezentować pożądane parametry elektryczne w temperaturach bliskich pokojowej, wykazywać stabilność pod wpływem naprężeń oraz być ekonomicznie opłacalne.

Celem projektu jest synteza i zbadanie materiałów wykazujących przejścia fazowe pierwszego rodzaju, których efektem jest „przełączenie” przenikalności elektrycznej wywołane zmianą temperatury. Planowane są badania monokryształów i cienkich warstw wybranych hybrydowych perowskitów organiczno-nieorganicznych, obejmujące szerokopasmową spektroskopię dielektryczną, pomiary strukturalne, badania w podczerwieni, pomiary ramanowskie oraz dylatometryczne.

Szczególne znaczenie będą mieć eksperymenty analizujące wpływ ciśnienia hydrostatycznego na przejścia fazowe i mechanizm „przełączania”. Izotermiczne pomiary pod ciśnieniem pozwolą oddzielić wpływ naprężenia od wpływu temperatury, co nie jest możliwe w standardowych pomiarach izobarycznych. Umożliwi to m.in. określenie zależności między warunkami termodynamicznymi a czasem trwania przejścia fazowego oraz ocenę stabilności i powtarzalności parametrów elektrycznych przed i po „przełączeniu”.

Ponieważ projekt jest realizowany w konsorcjum z Politechniką Wrocławską więc doktorantka/doktorant będzie miała możliwość współpracy z naukowcami i doktorantami z tamtejszego ośrodka.

Planowany wkład w rozwój dyscypliny

Realizacja projektu może istotnie poszerzyć wiedzę na temat molekularnych podstaw „przełączania” dielektrycznego w hybrydowych perowskitach organiczno-nieorganicznych. Wyniki mogą otworzyć nowe kierunki interpretacji zjawiska, łączące przejścia fazowe pierwszego rodzaju z działaniem różnych czynników termodynamicznych, w tym naprężeń mechanicznych.

layer systems, where stresses naturally arise from temperature changes or lattice mismatch.

To be practically useful, such materials must meet several criteria: they should be accessible through controlled synthesis, including fabrication as thin films; they must exhibit desirable electrical properties near room temperature; they should remain stable under mechanical stress; and their production cost must be reasonable.

The project aims to synthesize and investigate materials that undergo first-order phase transitions leading to temperature-induced changes in electric permittivity. The study will focus on selected hybrid organic–inorganic perovskites, examined both as single crystals and thin layers. Complementary characterization techniques will be employed, including broadband dielectric spectroscopy, structural studies, infrared and Raman measurements, and dilatometry.

A vital part of the research will address how hydrostatic pressure affects phase transitions and the resulting dielectric switching. Isothermal measurements under pressure will enable the separation of stress from thermal effects—something unattainable in standard ambient-pressure measurements. This approach will enable the correlation of thermodynamic conditions with the duration of the phase transition, helping to assess the stability and repeatability of electrical parameters before and after switching.

Since the project is carried out in consortium with Wrocław University of Science and Technology, the PhD student will have the opportunity to collaborate with researchers and doctoral students from that institution.

Planned contribution to the development of the discipline

The planned studies have the potential to significantly advance our understanding of the molecular origins of dielectric switching in hybrid perovskite materials. Scientifically, the project may open new perspectives on interpreting the switching phenomenon as a consequence of a first-order phase transition triggered by various thermodynamic factors, including mechanical stress.





Opis wymagań – wiedza, umiejętności i kompetencje społeczne kandydata

Mile widziane umiejętności:

- 1) Prowadzenie badań materiałów ciał stałych z wykorzystaniem spektroskopii dielektrycznej.
- 2) Znajomość metod i aparatury stosowanej w szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej.
- 3) Wiedza z zakresu hybrydowych materiałów metalo-organicznych (MOF/HOIP) oraz ich właściwości fizykochemicznych.

Description of requirements – knowledge, skills and social competences of the candidate

Preferred skills:

- 1) Experience in studying solid-state materials using dielectric spectroscopy.
- 2) Familiarity with experimental methods and instrumentation applied in broadband dielectric spectroscopy.
- 3) Knowledge of hybrid metal–organic materials (e.g., MOFs or hybrid perovskites) and their physicochemical properties.

