



You have downloaded a document from  
**RE-BUS**  
repository of the University of Silesia in Katowice

**Title:** Rola badań strukturalnych w poszukiwaniu nowych materiałów dla "zielonej" gospodarki

**Author:** Paweł Zajdel

**Citation style:** Zajdel Paweł. (2017). Rola badań strukturalnych w poszukiwaniu nowych materiałów dla "zielonej" gospodarki. W: E. Sierka, A. Nadgórska-Socha (red.), "Aktualne Problemy Ochrony Środowiska. Ocena Stanu, Zagrożenia Zasobów i Stosowane Technologie". (S. 90-91). Katowice : Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego.



Uznanie autorstwa - Użycie niekomercyjne - Bez utworów zależnych Polska - Licencja ta zezwala na rozpowszechnianie, przedstawianie i wykonywanie utworu jedynie w celach niekomercyjnych oraz pod warunkiem zachowania go w oryginalnej postaci (nie tworzenia utworów zależnych).



UNIWERSYTET ŚLĄSKI  
W KATOWICACH



Biblioteka  
Uniwersytetu Śląskiego



Ministerstwo Nauki  
i Szkolnictwa Wyższego

## Rola badań strukturalnych w poszukiwaniu nowych materiałów dla "zielonej" gospodarki

Paweł ZAJDEL

*Zakład Fizyki Kryształów, Instytut Fizyki im. A. Chelkowskiego, Uniwersytet Śląski w Katowicach;  
e-mail: pawel.zajdel@us.edu.pl; tel.: 323591978*

### Wstęp

Rok 2014 został ogłoszony przez UNESCO Światowym Rokiem Krystalografii, upamiętniając stulecie odkrycia przez M. Lauego dyfrakcji promieni rentgenowskich i jej późniejszego zastosowania przez W. H. Bragga i W. L. Bragga do określenia struktury krystalicznej materii. Rozwój metod badawczych i techniki komputerowej pozwala obecnie na badanie zmian struktury materiałów w czasie ich pracy (techniki *in-operando*), dostarczając informacji nie tylko o chemicznej budowie materii, ale również o fizycznych podstawach zachodzących w niej procesów.

### Cele pracy

Samowystarczalna energetycznie gospodarka wymaga szeregu zmian technologicznych w procesie wytwarzania energii i jej składowania. Podniesienie efektywności poszczególnych etapów możliwe jest dzięki lepszemu zrozumieniu podstaw fizycznych stojących za pożądanymi własnościami materii.

### Wyniki i ich omówienie

W badaniach rentgenowskich i neutronowych prowadzonych we współpracy z ośrodkami w Anglii i USA, poszukujemy odpowiedzi na pytanie, jakie parametry struktury decydują o wybranych własnościach makroskopowych. W pierwszej kolejności przedstawione zostaną wyniki badań strukturalnych materiałów używanych przy produkcji energii odnawialnej: hybrydowego perowskitu jako elementu ogniw fotowoltaicznych (Minns et al. 2017) oraz stałego elektrolitu będącego podstawą ogniwa paliwowego (SOFC) (Kuang et al. 2008). Następnie zaprezentowane zostaną mechanizmy separacji (Herm et al. 2013) i adsorpcji (Queen et al. 2011) różnych gazów w materiałach typu MOF (Metal Organic Framework) mających zastosowanie w klasycznej energetyce opartej na węglowodorach.

Dodatkowo przedstawione zostaną podstawy metody maksymalnej entropii i jej zastosowania w udokładnianiu struktur krystalicznych.

### Wnioski

Pomimo upływu ponad stulecia od odkrycia zjawiska dyfrakcji promieni rentgenowskich, metody dyfrakcyjne pozostają podstawowymi technikami określania struktury materii. Możliwość prowadzenia badań *in-situ/in-operando* daje wgląd w fizyczne podstawy zjawisk zachodzących w strukturze krystalicznej w czasie jej pracy, co pozwala na wydajniejsze projektowanie przyszłych materiałów.

### Literatura

1. Minns J. L., Zajdel P., Chernyshov D., van Beek W., Green M.A. 2017. Structure and interstitial iodide migration in the hybrid perovskite, methylammonium lead iodide Nature Commun. 8: 15152 DOI: 10.1038/ncomms15152
2. Kuang X., Green M. A., Niu H., Zajdel P., Dickinson C., Claridge J. B., Jantsky L., Rosseinsky M. J. 2008. Interstitial-oxide-ion conductivity in layered melilite, Nature Materials 7: 498-504
3. Herm Z. R., Wiers B. M., Mason J. A., van Baten J. M., Hudson M. R., Zajdel P., Brown C. M., Masciocchi N., Krishna R., Long J. R. 2013. Separation of hexane isomers in a metal-organic framework with triangular channels. Science 340(6135): 960-964
4. Queen W. L., Brown C. M., Britt D. K., Zajdel P., Hudson M. R., Yaghi O. M. 2011. Site-Specific CO<sub>2</sub> Adsorption and Zero Thermal Expansion in an Anisotropic Pore Network J. Phys. Chem. C, 115: 24915-24919

## Structural Studies in Search for New Materials for 'Green' Economy

Paweł ZAJDEL

*Department of Physics of Crystals, The August Chelkowski Institute of Physics, University of Silesia in Katowicach;  
4 Uniwersytecka 40-007 Katowice; e-mail: pawel.zajdel@us.edu.pl; tel.: +48 323591978*

### Introduction

Year 2014 was pronounced by the UNESCO as the Year of Crystallography to commemorate the discovery of diffraction of x-rays by M. von Laue and its application by W. L. Bragg and W. H. Bragg to determination of crystal structures. Development of experimental method and computers allows nowadays to investigate materials during operation (techniques *in-operando*), providing information not only about their structures but also giving insight into physical foundations of the processes.

### Aims of the work

Sustainable economy requires many technological changes in production and storage of energy. Better understanding of physical background of the desired properties of materials makes possible to increase the efficiency of each of the stages. The answers to the question: 'Which structural features are responsible for particular macroscopic behaviour?' is sought using neutron and x-ray scattering.

### Results and discussion

A selection of structural studies carried out with cooperation with centres in the USA and the UK will be presented. The first part of the presentation will cover materials essential in production of renewable energy: a hybrid perovskite as an element of a photovoltaic cell (Minns et al. 2017) and a solid electrolyte as a basis for a Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) (Kuang et al. 2008). The next part will be devoted to processes of separation (Herm et al. 2013) and adsorption (Queen et al. 2011) of gases in MOF (Metal Organic Framework) materials used in hydrocarbon based economy.

The talk will also introduce the Maximum Entropy Method as a tool for structural refinement.

### Conclusions

Despite over centennial anniversary of the structural studies using x-rays, the diffraction based techniques remain the fundamental methods in the determination of structures of materials. The possibility to carry out research *in-situ/in-operando* gives us a chance to gain unprecedented knowledge about physical principles governing performance of the materials during their operation. This information will allow us to further improve required features of the devices used in 'green' economy.

### References

1. Minns J. L., Zajdel P., Chernyshov D., van Beek W., Green M.A. 2017. Structure and interstitial iodide migration in the hybrid perovskite, methylammonium lead iodide Nature Commun. 8: 15152 DOI: 10.1038/ncomms15152
2. Kuang X., Green M. A., Niu H., Zajdel P., Dickinson C., Claridge J. B., Jantsky L., Rosseinsky M. J. 2008. Interstitial-oxide-ion conductivity in layered melilite, Nature Materials 7: 498-504
3. Herm Z. R., Wiers B. M., Mason J. A., van Baten J. M., Hudson M. R., Zajdel P., Brown C. M., Masciocchi N., Krishna R., Long J. R. 2013. Separation of hexane isomers in a metal-organic framework with triangular channels. Science 340(6135): 960-964
4. Queen W. L., Brown C. M., Britt D. K., Zajdel P., Hudson M. R., Yaghi O. M. 2011. Site-Specific CO<sub>2</sub> Adsorption and Zero Thermal Expansion in an Anisotropic Pore Network J. Phys. Chem. C, 115: 24915-24919