

Теоретический анализ кристаллических структур гибридных галогенидов свинца, производных от структурного типа перовскита

Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна

Кобелева Елена Алексеевна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: Kobeleva.elena.2001@gmail.com

Органо-неорганические галогениды, кристаллизующиеся в структурном типе перовскита, с общей формулой ABX_3 (где A^+ - органический катион метиламмония или формамидиния, B^{2+} - Pb^{2+} , Sn^{2+} , X^- - анионы галогенов) привлекают внимание научного общества благодаря своим оптоэлектронным свойствам. При увеличении размеров органических катионов, такие соединения кристаллизуются в производных от перовскита структурных типах, где размерность неорганической подструктуры уменьшается с 3D до размерностей 2D, 1D и 0D.

Различные 2D-перовскитоподобные фазы представляют наибольший интерес для исследователей среди низкоразмерных гибридных перовскитоподобных соединений, поскольку, варьируя искажения неорганической подструктуры с помощью введения различных органических катионов, можно настраивать ширину запрещенной зоны в этих соединениях [2]. На сегодняшний день существуют различные подходы к классификации «2D-перовскитов». Так, например, выделяют 3 типа структур исходя из ориентации $[BX_6]^{4-}$ октаэдров: (100), (110) и (111) [1,4]. В структурах типа (100) имеется своя классификация в зависимости от величины сдвига соседних слоев октаэдров друг относительно друга — это деление структур на фазы Диона-Якобсона (DJ) и Радделсдена-Пошпера (RP). Однако, такая классификация не может описать кристаллографическую взаимосвязь всех расшифрованных на сегодняшний день структур «2D-перовскитов», поскольку существует ещё ряд промежуточных структурных типов между DJ и RP. На основе базы данных структур «2D-перовскитов», были выведены все взаимосвязи между структурами «2D-перовскитов» с использованием формализма Бернигаузена, который показывает как связана симметрия неорганических подструктур на основе соотношений группа(G) - подгруппа(H) [3,5]. Такой подход послужит основанием для построения алгоритмов по автоматизации анализа порошковых дифрактограмм.

Источники и литература

- 1) Марченко Е.И., Королев В.В., Митрофанов А., Фатеев С.А., Гудилин Е.А., Тарасов А.Б.// Chem. Mater. 2021, 33, 4, 1213-1217
- 2) Марченко Е.И., Королев В.В., Фатеев С.А., Митрофанов А., Еремин Н.Н., Гудилин Е.А., Тарасов А.Б.// Chem. Mater. 2021, 33, 18, 7518-7526
- 3) Марченко Е.И., Фатеев С.А., Петров А.А., Королев В.В., Митрофанов А., Петров А.В., Гудилин Е.А., Тарасов А.Б.// Chem. Mater. 2020, 32, 17, 73383-7388
- 4) Lingling Mao, Constantinos C. Stoumpos, Mercouri G. Kanatzidis//J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 3, 1171-1190
- 5) Bernstein J., Colman P., Helliwell J.R., Kantardjieff K.A., Mak T., Müller P., Ohashi Y., Paufler P., Schenk H., Viterbo D. (Chairman)//International Union of crystallography book series. 2013.