

Кристаллохимические закономерности формирования фаз низкоразмерных перовскитоподобные галогеноп्लомбатов с компактными органическими катионами: взаимосвязь состав-структура-свойства

Научный руководитель – Фатеев Сергей Анатольевич

Рябова Анна Дмитриевна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет наук о материалах, Кафедра междисциплинарного материаловедения, Москва, Россия

E-mail: anna.riabova@mail.ru

Гибридные галогеноп्लомбаты с перовскитоподобной структурой представляют собой растущий класс полупроводников, привлекающий все большее внимание мирового научного сообщества благодаря своему уникальному набору оптических и электронных свойств, таких как прямая запрещенная зона, высокие коэффициенты оптического поглощения, длительное время жизни носителей заряда, а также «нечувствительность» к дефектам, что делает их почти идеальными материалами для фотовольтаики и оптоэлектроники. Другой уникальной особенностью семейства гибридных галогеноп्लомбатов является уникальная структурная гибкость, выражающаяся в способности формировать структуры с пониженной размерностью неорганического каркаса во всём диапазоне структур - от трёхмерных (3D) до «нульмерных» (0D).

В настоящее время, классическая стратегия структурного дизайна таких гибридных соединений основана на концепции достижения желаемой размерности за счет введения объемных органических катионов, которые действуют как темплат для структуры. В данной работе впервые показан альтернативный подход к уменьшения структурной размерности за счет последовательного «расщепления» анионного каркаса исходного трёхмерного галогеноп्लомбата $APbI_3$ (A^+ - катион формаидиния/метиламмония) путем добавления солей $FA(MA)I$ с образованием производных соединений A_nPbX_{x+n} с пониженной размерностью структуры.

В частности, были получены и охарактеризованы 4 новые низкоразмерные фазы (рис. 1): 1D - FA_3PbI_5 , «1.5D» - $(MA_yFA_{1-y})_{26}Pb_{10}I_{36}$ 2D - FA_2PbI_4 , «2.5D» - $(MA_yFA_{1-y})_{1.5}PbI_{3.5}$. Уточнение структур проведено с использованием данных порошковой рентгеновской дифракции методом Ритвельда, за исключением фазы «2.5D», структура которой была решена на основании данных РСА. Кроме того, были установлены фазовые равновесия между найденными соединениями, по результатам которых построена фазовая диаграмма системы PbI_2 -MAI-FAI.

Экспериментально выявлено последовательное увеличение ширины оптической запрещенной зоны и максимумов фотолюминесценции в ряду снижения размерности структуры фаз $3D < 2.5D < 2D < 1D$. Квантово-химические расчеты предсказывают монотонное снижение электронной размерности вместе со снижением структурной, кроме того снижается дисперсия в области максимума валентной зоны и минимума зоны проводимости.

Иллюстрации

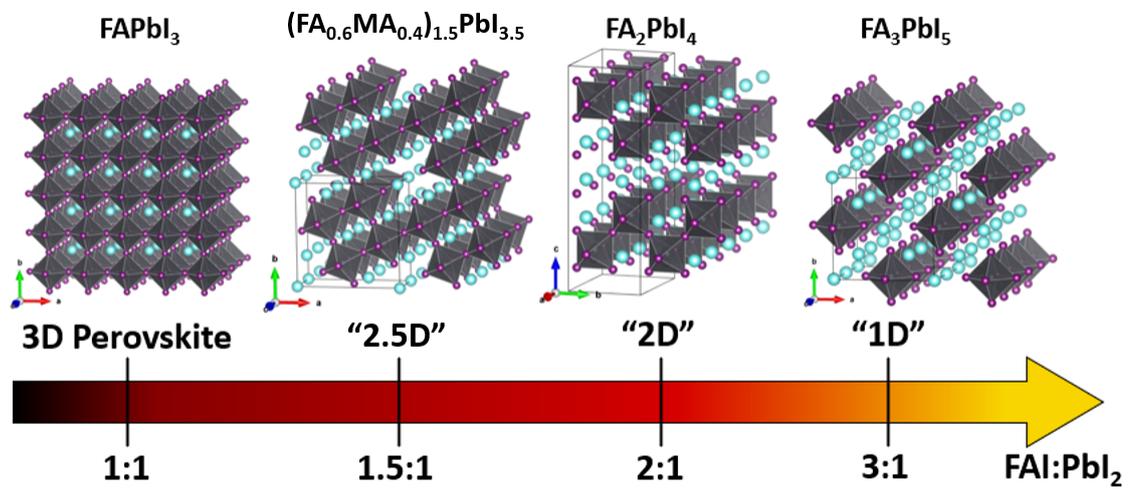


Рис. 1. Зависимость структуры от номинального состава