**Синтез и фотолюминесцентные свойства броминдатов и бромовисмутатов со структурой двойного перовскита**

***Чжу Чжилинь, Камилов Р.Х., Иброхимов М.М.***

*Студентка, 1 курс магистратуры*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: Zzl2295869529@163.com*

В последние годы большое внимание уделяется фотоэлектрическим системам галогенированных металлов перовскита. Каждый год эффективность перовскитных солнечных батарей повышается, и в настоящее время эффективность лучших представителей превышает 25%. В дополнение к использованию в солнечных батареях, галогенидные перовскиты также используются для производства светоизлучателей, светодиодов (LED), лазеров, фотоэлектрических детекторов и так далее. Галогенидные двойные перовскиты имеют общую химическую формулу А2В+B3+Х6. Состав Cs2AgBiBr6 был предложен в качестве одного из неорганических, химически стабильных и нетоксичных заменителей галогенплюмбатов(II) метиламмония. Однако широкая непрямая запрещенная зона фазы Cs2AgBiBr6 предполагает, что его применение в фотовольтаике ограничено. Чтобы решить эту проблему, были предприняты попытки регулировать ширину запрещенной зоны путем легирования материала.

Исследование литературных данных показало, что ширина запрещенной зоны для смешанных составов обычно оказывается меньше, чем у чистых перовскитов на основе Bi и Sb. Целью научно-исследовательской работы является синтез и изучение фотолюминесцентных свойств сложных галогенидов Cs2AgBi1-x(Sb/In)xBr6.

В качестве основных подходов для синтеза составов двойных перовскитов и бинарных бромидов, способных кристаллизоваться из расплава в условиях эксперимента, были выбраны твердофазный и гетерофазный ампульный синтез. Первичное исследование равновесий проводили для тройной системы CsBr-BiBr3-SbBr3 на примере девяти образцов общего состава Cs3Bi2-xSbxBr9 , где x=0-0,2, 0,85-1. Образцы синтезировали при температуре отжига 650◦C.

Образцы исследовали методом рентгенофазового анализа. По результатам РФА образцов Cs3Bi2-xSbxBr9 полученные дифрактограммы соответствуют стандартной рентгеновской дифракционной картине для фазы Cs3Bi2Br9 без фазовых примесей, что указывает на относительную чистоту полученных фаз. Гексагональная структура и пространственная группа (P-3m1) фаз Cs3Bi2Br9 и Cs3Sb2Br9 одинаковы. При этом, поскольку ионный радиус Sb3+ меньше ионного радиуса Bi3+, характерные пики (102) и (202) в данных РФА смещаются в сторону большего угла 2θ по мере увеличения степени замещения, что указывает на вхождение Sb3+ в решетка Cs3Bi2Br9.

Чтобы лучше продемонстрировать успешное легирование Sb3+, параметры решетки были рассчитаны с помощью программы Jana2006. Поскольку ионы Bi3+ (154,7pm) и Sb3+ (145pm) имеют близкие ионные радиусы и одинаковую кристаллическую структуру двух концевых элементов, линейная зависимость изменения объема элементарной ячейки вполне соответствует требованиям закона Вегарда для твердых растворов замещения.

В дальнейшем планируется повторить эксперимент для составов Cs3Bi2-х(Sb/In)xBr9, а также выбрать условия для синтеза однофазных образцов общего состава Cs2AgBi1-x(Sb/In)xBr6, установить границы областей растворимости для соответствующих твердых растворов замещения.

**Литература**

1. Dai S, Gan X, Li K, et al. Bandgap lowering in mixed alloys of Cs3Bi2-xSbxBr9 perovskite powders[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2023, 25(45): 30993-31002.