Исследование спектров поглощения и отражения высокого разрешения в терагерцовом и дальнем инфракрасном диапазоне монокристаллов гибридных металлоорганических перовскитов

В.Е. Аникеева^{1,2}, К.Н. Болдырев^{1,2}, О.И. Семенова³, М.Н. Попова¹

¹ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва, 108840, Физическая, 5

² Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, 101000, Мясницкая, 20

³ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, 630090, пр. ак. Лаврентьева, 13

тел: +7 (913) 392-7029, факс: +7 (495) 851-0886, эл. почта: vanikeeva@hse.ru

DOI 10.34077/RCSP2021-91

Гибридные металлоорганические перовскиты (МОП) относятся к классу полупроводниковых материалов, применяемых при создании оптоэлектронных устройств. В однокомпонентных солнечных элементах на основе МОП в апреле 2021 года была достигнута 25,6% эффективность преобразования солнечной энергии в электрическую [1]. Рекордные показатели однокомпонентных солнечных элементов на основе МОП обусловлены такими свойствами как большая длина диффузии и высокая подвижность носителей заряда, а также широкая полоса поглощения в спектре солнечного излучения [2]. Исследование особенностей электрон-фононного взаимодействия позволяет прояснить природу и высокие значения многих характеристик гибридных перовскитов.

Рис. 1. Спектры отражения в частотном диапазоне от 30 до 400 см^{-1} монокристалла $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при четырёх температурах: 350 K, 170 K, 100 K и 5 K. На вставке справа представлена увеличенная часть спектра при 5 K с наблюдаемой впервые торсионной модой при 306 см^{-1} .

В данной работе представлено спектроскопическое исследование спектров отражения в терагерцовом диапазоне и поглощения в среднем и дальнем инфракрасном диапазоне монокристаллов МОП $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($\text{X} = \text{I}, \text{Br}$). Крупные монокристаллы хорошего качества были синтезированы в ИФП СО РАН по методике, описанной в работе [3]. Спектры отражения и поглощения были измерены с высоким разрешением (до 0,2 см^{-1}) в температурном диапазоне 5 – 350 K на уникальной научной установке в ИСАН. 12 низкочастотных мод и торсионная мода молекулярного катиона CH_3NH_3^+ (306 см^{-1}) (см. Рис. 1) обнаружены впервые. Для наиболее сильных мод параметры Грюнайзена отрицательны, что указывает на взаимодействие с мягкой модой. Выраженные особенности наблюдаются в многофононных спектрах в районе 160 K, что соответствует фазовому переходу из тетрагональной в орторомбическую фазу. при температурах ниже 70 K расщепление спектральных линий предположительно связано с туннельным расщеплением [4].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ (№ 19-72-10132) и Министерства науки и высшего образования РФ (ГЗ 0039-2019-0004 и 0306-2019-0015 – рост кристаллов, О.И.С.).

Литература

- [1] J. Jeong, et al. // Nature. 2021. V.592. P.381-385.
- [2] C. La-o-vorakiat, et. al. // J. Phys. Chem. Lett. 2016. V.7., 1. P.1-6.
- [3] O. Semenova, et. al. // J. Cryst. Growth. 2017. V.462. P.45-49.
- [4] K. Boldyrev, et. al. // J. Phys. Chem. C. 2020. V.124. P.23307-23316.