Оптоэлектронные свойства и структурные переходы в монокристаллах металлоорганических перовскитов

Аникеева В.Е.^{1,2}, Семёнова О.И.³, Шмаков А.Н.⁴, Болдырев К.Н.¹

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

² МФТИ (НИУ), 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9

³ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

⁴ ИК СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 5

DOI 10.34077/Semicond2019-44

Подходящие оптические и фотовольтаические характеристики, такие как оптимальная ширина запрещённой зоны (около 1,5 эВ), коэффициент поглощения видимого излучения (10^5 см^{-1}), высокое значение диффузионной длины (175 мкм), а также низкая стоимость синтеза с недавнего времени привлекли внимание исследователей к металлоорганическим перовскитам. Удалось достичь КПД, равного 22,1%, при создании тонкоплёночных солнечных элементов на основе металлоорганических перовскитов [1].

В данной работе исследовались монокристаллы $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, синтезированные из насыщенного раствора с понижением температуры (Рис. 1). Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии был подтверждён состав синтезированных монокристаллов.

Два структурных фазовых перехода в $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ из орторомбической фазы в тетрагональную при температуре 150 – 160 К, и из тетрагональной фазы в кубическую при температуре 320 – 330 К наблюдались методом рентгеновской дифракции в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (Рис. 2).

Рис.1. — Фотография синтезированных монокристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Рис.2. — Фазовый переход в спектрах рентгеновской дифракции.

Также структурные фазовые переходы были исследованы в температурной зависимости спектров фотолюминесценции, спектров пропускания и спектров отражения в температурном диапазоне от 5 К до 330 К. Резкий сдвиг края поглощения в длинноволновую область спектра при температуре 161 К свидетельствует о структурном фазовом переходе первого рода из орторомбической фазы (5 – 160 К) в тетрагональную (от 160 К до 350 К), что соответствует опубликованным данным [2]. Исследованы спектры поглощения в области внутренних молекулярных колебаний метиламмония, по которым наблюдалось существенное изменение частот колебаний и количества полос поглощения при фазовых переходах, что может

свидетельствовать о значительном вкладе катиона метиламмония при структурных фазовых переходах.

[1] W. S. Yang et al., *Science* 356, 1376 (2017).

[2] P. S. Whitfield, et al., *Sci. Rep.* 35685, 6 (2016).