Упругие и оптические свойства монокристаллов перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ вблизи структурных фазовых переходов

Жевстовских И.В.¹, Аверкиев Н.С.², Гудков В.В.³, Сарычев М.Н.³, Титова С.Г.⁴,
Семенова О.Е.⁵, Терещенко О.Е.⁵

¹ ИФМ УрО РАН, 620137, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

² Иоффе Институт, 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26

³ Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

⁴ Институт металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

⁵ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

DOI 10.34077/Semicond2019-51

Органические-неорганические гибридные полупроводники обладают многими уникальными электронными и оптическими свойствами, которые в перспективе могут найти применение в устройствах фотовольтаики и оптоэлектроники. В последние годы значительный интерес вызывает изучение свойств относящегося к такому классу полупроводников соединения $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, солнечные элементы на основе которого показывают высокий (до 20%) коэффициент полезного действия [1,2]. Уникальность свойств гибридных перовскитов в значительной мере определяется их более сложной структурой по сравнению с обычными материалами для фотовольтаики, такими, как Si, CIGS, CdTe. Было установлено, что $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ имеет три структурные фазы: кубическую $Pm-3m$ выше 330 К, тетрагональную $I4/mcm$ в интервале температур 160-330 К, и орторомбическую $Pnma$ ниже 160 К [3]. Данная работа была выполнена с целью установления взаимосвязи структурных фазовых переходов и физических свойств монокристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. Были проведены исследования структуры в интервале 100-360 К, упругих свойств и фотолюминесценции при температурах 4-350 К.

Рентгеноструктурный анализ выявил все три фазы: структурный переход при 160 К из тетрагональной в орторомбическую фазу сопровождался скачком объема примитивной ячейки, что характеризует его как фазовый переход I рода. Вблизи этого фазового перехода мы обнаружили аномальное поведение упругих и оптических свойств - скачок на температурной зависимости упругого модуля C_{11} и острый пик поглощения ультразвука, а также максимумы на температурной зависимости интенсивности и положения пика фотолюминесценции с $\lambda = 780$ nm (Рис.1). При переходе из кубической в тетрагональную фазу значительного изменения в фотолюминесценции не было выявлено, но в упругих свойствах вблизи 330 К были обнаружены аномалии упругих свойств, характерные для фазовых переходов II рода. В орторомбической фазе наблюдались дополнительные полосы поглощения фотолюминесценции. Установлена взаимосвязь упругих и оптических свойств со структурными фазовыми переходами. Работа выполнена в рамках государственного задания МИНОБРНАУКИ России № АААА-А18-118020190098-5.

Рис.1. — Спектр фотолюминесценции кристалла $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

[1] J. Berry et al., *Advances Materials*, **27**, 5102 (2015).

[2] W.S. Yang et al., *Science*, **348**, 1243 (2015).

[3] P.S. Whitfield et al., *Scientific Reports*, **6**, 35685 (2016).