

НАНОФИЗИКА И НАНОЭЛЕКТРОНИКА

Труды XXVII Международного симпозиума

13–16 марта 2023 г., Нижний Новгород

Том 2

Секция 3

Полупроводниковые наноструктуры: электронные, оптические свойства, методы формирования

Секция 5

Многослойная и кристаллическая рентгеновская оптика

Нижний Новгород
ИПФ РАН
2023

УДК 538.9(063)
ББК 22.37я431
32.844.2я431
Н-25

Н-25 В 2 томах. Том 2-й. — Нижний Новгород : ИПФ РАН, 2023. — 468 с.
ISBN 978-5-8048-0120-6

Организаторы

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Отделение физических наук РАН
Научный совет РАН по физике полупроводников
Научный совет РАН по физике конденсированных сред
Институт физики микроструктур РАН
Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского
Благотворительный фонд «От сердца к сердцу»

Сопредседатели программного комитета

С. В. Гапонов, академик РАН, ИФМ РАН, Нижний Новгород;
З. Ф. Красильник, чл.-корр. РАН, ИФМ РАН, Нижний Новгород.

Учёный секретарь Симпозиума

Д. А. Татарский, к.ф.-м.н., ИФМ РАН, Нижний Новгород

Программный комитет

А. Ю. Аладышкин, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
В. В. Бельков, д.ф.-м.н.	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
И. С. Бурмистров, д.ф.-м.н.	ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, Черногловка
В. А. Бушуев, д.ф.-м.н.	МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
В. А. Быков, д.т.н.	NT-MDT Spectrum Instruments, Москва
В. А. Волков, д.ф.-м.н.	ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Москва
В. И. Гавриленко, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
А. Б. Грановский, д.ф.-м.н.	МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
К. Н. Ельцов, д.ф.-м.н.	ИОФ им. А. М. Прохорова РАН, Москва
С. В. Зайцев-Зотов, д.ф.-м.н.	ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Москва
С. В. Иванов, д.ф.-м.н.	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
Е. Л. Ивченко, чл.-корр. РАН	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
В. В. Кведер, академик РАН	ИФТТ РАН, Черногловка
И. В. Кукушкин, академик РАН	ИФТТ РАН, Черногловка
В. Д. Кулаковский, академик РАН	ИФТТ РАН, Черногловка
А. В. Латышев, академик РАН	ИФП СО РАН им. А. В. Ржанова, Новосибирск
А. С. Мельников, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
М. А. Мильяев, д.ф.-м.н.	ИФМ УрО РАН им. М. Н. Михеева, Екатеринбург
В. Л. Миронов, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
С. А. Никитов, чл.-корр. РАН	ИРЭ им. В. А. Котельникова РАН, Москва
А. В. Новиков, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Д. В. Рощупкин, д.ф.-м.н.	ИПТМ РАН, Черногловка
В. В. Рязанов, д.ф.-м.н.	ИФТТ РАН, Черногловка
А. В. Садовников, к.ф.-м.н.	СГУ им. Н. Г. Чернышевского, Саратов
Н. Н. Салащенко, чл.-корр. РАН	ИФМ РАН, Нижний Новгород
М. В. Сапожников, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
А. А. Саранин, чл.-корр. РАН	ИАПУ ДВО РАН, Владивосток
Ю. А. Филимонов, д.ф.-м.н.	Саратовский филиал ИРЭ РАН, Саратов
А. А. Фраерман, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Д. Р. Хохлов, чл.-корр. РАН	МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
А. В. Чаплик, академик РАН	ИФП СО РАН им. А. В. Ржанова, Новосибирск
Н. И. Чхало, д.ф.-м.н.	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Т. В. Шубина, д.ф.-м.н.	ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

Организационный комитет

В. Г. Беллюстина	ИФМ РАН, Нижний Новгород
М. В. Зорина	ИФМ РАН, Нижний Новгород
А. В. Иконников	МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва
Д. А. Камелин	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Р. С. Малофеев	ИФМ РАН, Нижний Новгород
М. С. Михайленко	ИФМ РАН, Нижний Новгород
С. В. Морозов	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Е. Н. Садова	ИФМ РАН, Нижний Новгород
Е. Е. Пестов	ИФМ РАН, Нижний Новгород

ISBN 978-5-8048-0120-6

ББК 22.37я431

32.844.2я431

© ИПФ РАН, 2023

© ИФМ РАН, 2023

Электрон-фононное взаимодействие в нанокристаллах перовскитов, выращенных во фторфосфатном стекле

М. Н. Батаев^{1,*}, М. С. Кузнецова¹, Д. В. Панькин¹, М. Б. Смирнов¹, С. Ю. Вербин¹, И. В. Игнатъев¹, И. А. Елисеев², В. Ю. Давыдов², А. Н. Смирнов², Е. В. Колобкова^{3,4}

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, 1, Санкт-Петербург, 198504

² Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Политехническая ул., 26, Санкт-Петербург, 194021

³ Национальный исследовательский университет ИТМО, Биржевая линия В.О., д. 14, Санкт-Петербург, 199034

⁴ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Московский проспект, 26, Санкт-Петербург, 190013

* batae1996@gmail.com

В спектрах фотолюминесценции (ФЛ) нанокристаллов перовскитов CsPbBr₃, выращенных во фторфосфатной стеклянной матрице, обнаружены фонные повторения экситонной линии. Измерены спектры комбинационного рассеяния света (КРС) для нанокристаллов CsPbBr₃, и выполнен расчет спектра фонных состояний этих кристаллов в орторомбической фазе. Проведено сравнение частот фононов, наблюдаемых в спектрах ФЛ и спектрах КРС, с результатами расчета.

Практическое применение нанокристаллов (НК) перовскитов требует глубокого изучения их фундаментальных свойств. Объектом нашего исследования являются НК на основе галогенидов цезия и свинца, выращенные во фторфосфатной стеклянной матрице [1]. НК демонстрируют яркую фотолюминесценцию (ФЛ) и, в зависимости от химического состава и размера, могут излучать во всем видимом спектральном диапазоне.

В настоящей работе исследованы спектры комбинационного рассеяния света (КРС) и фонных повторений экситонных переходов при возбуждении в полосу ФЛ. Выполнен расчет частот оптических фононов, активных в КРС, и полярных фононов, участвующих в ФЛ. Проведено сравнение результатов эксперимента и расчета. Показано, что спектр фонных состояний несет важную информацию о кристаллической структуре НК и об их химическом составе.

Эксперимент

Были исследованы НК с характерным размером 15 нм, выращенные в стеклянной матрице с помощью технологии, описанной в работе [1]. Измерение спектров КРС при температуре $T = 7$ К проводилось с помощью спектрометра T64000, снабженного конфокальным микроскопом. В качестве источника возбуждения использовался лазер с длиной волны $\lambda_{\text{exc}} = 633$ нм. На рис. 1 приведен спектр КРС для НК CsPbBr₃. Для получения этого спектра был измерен спектр стекла без НК и спектр КРС воздуха, которые были вычтены из исходного спектра.

Особенности, связанные с фононами, также наблюдаются в спектрах ФЛ. Они хорошо видны в стоксовой области спектра при резонансном возбуждении в нижний край полосы ФЛ НК CsPbBr₃ (рис. 2). С ростом температуры фонные реплики быстро уходят и уменьшаются по интенсивности, поэтому измерения проводились при температуре $T = 11$ К. Фонные повторения возбужденных светом лазера экситонов обусловлены взаимодействием с полярными фононами. Интегральная интенсивность основных равноотстоящих пиков s1 – s4 быстро убывает с увеличением номера. Несмотря на то, что такое поведе-

ние качественно согласуется с простой моделью Хуана — Риса, для его количественного описания требуется более сложная модель [2].

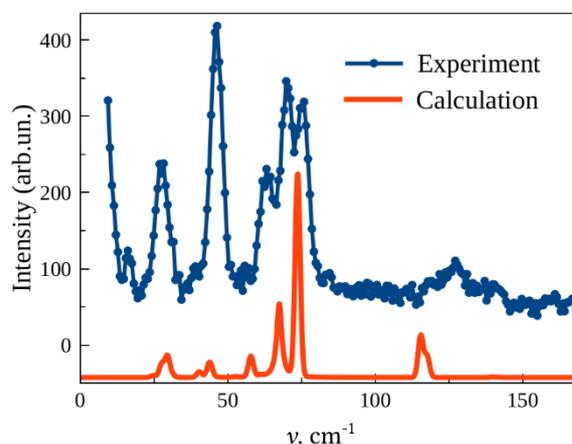


Рис. 1. Спектр КРС НК CsPbBr₃ (синяя линия), измеренный при температуре 7 К, и расчетный спектр фононов для орторомбической фазы (красная линия)

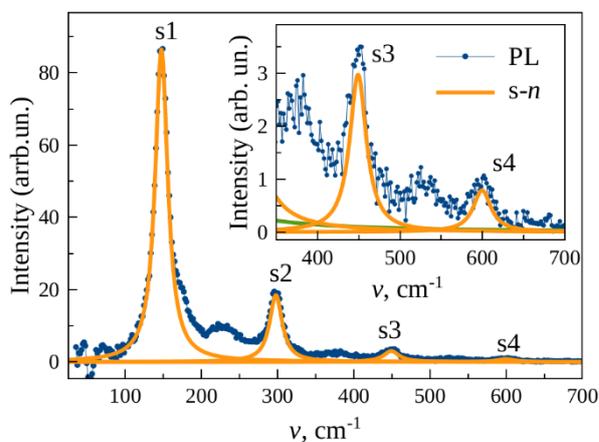


Рис. 2. Спектр фонных повторений НК CsPbBr₃ при резонансном возбуждении, $\lambda_{\text{exc}} = 532$ нм. Плавная составляющая ФЛ вычтена. Сплошные линии — подгонка контурами Лоренца. На вставке показаны третье и четвертое фонные повторения в увеличенном масштабе. $T = 11$ К

Расчет фононных спектров

Расчет электронной структуры и спектра КРС проводился в рамках GGA-приближения теории функционала плотности с PBE-функционалом и нормосохраняющим псевдопотенциалом в программе Castep (Material Studio) [3, 4]. Значение энергии отсечки при построении базиса в плоских волнах составляло 1200 эВ. Для решения электронной задачи был задан критерий самосогласованности поля равным $5 \cdot 10^{-7}$ эВ/атом. Размерность k-сетки была выбрана равной $3 \times 2 \times 3$ (шаг 0.04 1/Å). Оптимизация геометрии была проведена до достижения остаточных сил и напряжений, не превышающих 0.01 эВ/Å и 0.02 ГПа соответственно. Для оптимизированной структуры фононные частоты вычислялись методом линейного отклика (DFPT) [5].

В результате оптимизации геометрии для орторомбической модификации CsPbBr₃ с пространственной группой *Rnma* и четырьмя формульными единицами в ячейке были получены следующие параметры ячейки: 8.402, 11.756 и 8.179 Å. Они близки к найденным экспериментально в работе [6]: 8.186, 11.659 и 8.098 Å. Для орторомбической модификации предсказываются 24 моды, активные в КРС, характеризующиеся неприводимыми представлениями в точке Г: $7A_g + 5B_{1g} + 7B_{2g} + 5B_{3g}$. При этом наибольшая активность в спектре КРС предсказывается: (1) для мод A_g , частоты ν которых равны 27.65, 43.97, 57.86, 67.49, 115.53 см^{-1} , (2) для мод B_{2g} с частотами 29.58, 73.71 см^{-1} и (3) для моды B_{3g} с частотой 117.6 см^{-1} .

На рис. 1 показан модельный спектр КРС объемного кристалла CsPbBr₃ в орторомбической фазе, построенный на основе расчетных значений частот и интенсивностей оптически активных фононных колебаний. Ширина линий на полувысоте принята равной 2 см^{-1} . Следует отметить, что большинство линий

КРС, наблюдаемых в эксперименте, содержатся в расчетном спектре, однако интенсивности линий не соответствуют эксперименту. Возможными причинами этих различий является случайная ориентация нанокристаллов, квантово-размерный эффект и влияние стекляннной матрицы.

Фононные повторения в спектрах ФЛ формируются нечетными колебаниями решетки. Расчет показывает, что основные фононные реплики $s1 - s4$, показанные на рис. 2, формируются, скорее всего, наиболее интенсивными в ИК-спектре LO-фононами. Полученная в расчете частота этих колебаний, $\nu \approx 140 \text{ см}^{-1}$, близка к экспериментальному значению $\nu = 147 \text{ см}^{-1}$. Между основными фононными репликами наблюдаются широкие дополнительные особенности, которые формируются многими нечетными фононами.

Финансирование

Авторы благодарят Санкт-Петербургский государственный университет за финансовую поддержку в рамках грантов № 94030557 и № 94271404 и гос. задания ФТИ им. А. Ф. Иоффе (0040-2019-0006).

Литература

1. E. V. Kolobkova, M. S. Kuznetsova, N. V. Nikonov // *J. Non-Cryst. Solids*, **563**, 120811 (2021).
2. V. S. Krivobok, S. N. Nikolaev, V. S. Bagaev, *et al.* // *JETP Lett.*, **114**, 98 (2021).
3. S. J. Clark, M. D. Segall, C. J. Pickard, *et al.* // *Z. Kristallogr.*, **220** (5/6), 567 (2005).
4. Keith Refson, Paul R. Tulip, and Stewart J. Clark // *Phys. Rev. B*, **73** (15), 155114 (2006).
5. X. Gonze, C. Lee. // *Phys. Rev. B*, **55**, 10355 (1997).
6. M. Szafranski, A. Katrusiak, and K. Ståhl // *J. Mater. Chem. A*, **9** (17), 10769 (2021).