

Моделирование металлоорганических перовскитов, структурированных наноалмазами детонационного синтеза

Жогаля Н.Н.¹, Алексеев Н.И.^{1,2}, Алёшин А.Н.², Ненашев Г.В.², Орешко И.В.^{1,2}

nikita2000.27@mail.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

² ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Гибридные перовскиты эффективно поглощают свет и характеризуются простотой химических растворных методов при их синтезе и обработке. Работа посвящена интерпретации исследования плёнки гибридного металлоорганического перовскита типа метиламмоний-Pb-гаоген₃ (MAPbX₃), модифицированного наноалмазами детонационного синтеза, кратко DND-частиц [1]. Наиболее яркий результат — способность плёнок частично восстанавливать дифференциальную проводимость G после спада, наблюдавшегося в ходе экспериментов, по прошествии нескольких суток. Интерпретация базируется на том, что кластеры диэлектрического перовскита вокруг DND-частиц в целом не имеют заряда. Структура потенциала внутри кластеров и с учётом поля F на интерфейсах с DND имеет вид потенциальных горбов и ям. Перераспределение галогенов внутри этого рельефа в ходе протекания тока и связанной с ним электромиграции характеризуется временами, различающимися на много порядков.

При этом исходная структура функциональных групп, анализируется методами теории функционала плотности (DFT) и полуэмпирикой. Существенно, что регулярная картина ям и холмов, обеспечивающая хорошо разделенные во времени спад и восстановление проводимости, наиболее явно выражена в условиях n- или p-легирования DND-частиц традиционными для алмаза атомами примеси — бором и фосфором. В этом случае моделирование, учитывающее взаимовлияние полей примеси внутри DND и характерных функциональных групп на их периферии, указывает на наибольшее увеличение энергии связи при определенном типе легирования.

Ссылки

1. G.V. Nenashev, A.N. Aleshin, N.I. Alekseev, M.S. Dunaevskiy, V.Yu. Dolmatov. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2025. Vol. 36. No. 1498.