

# Iterbiu legiruoti cezio švino halidų perovskitų milteliai

## Ytterbium doped caesium lead halide perovskite powder

Simona Streckaitė, Lukas Miklušis, Karolina Maleckaitė, Lamiaa Abdelrazik, Vidmantas Jašinskas, Vidas Pakštas, Audrius Drabavičius, Danielis Rutkauskas, Marius Franckevičius, Vidmantas Gulbinas  
Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius  
simona.streckaite@ftmc.lt

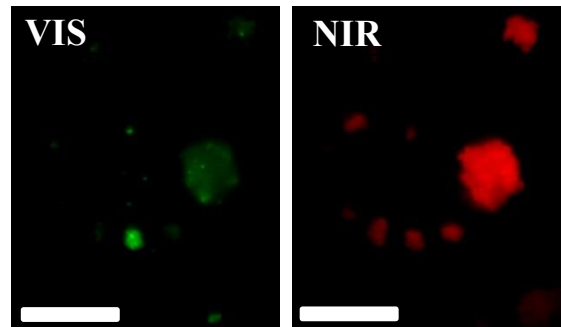
Perovskitai – įvairi medžiagų, pasižyminčių skirtingomis fizinėmis ir optinėmis savybėmis, klasė. Pastaruoju metu jie sulaukia vis didesnio dėmesio dėl puikios veikimo saulės elementuose, taip pat, kaip labai efektyvios šviesą žemyn konvertuojančios medžiagos [1-3]. Perovskitai, paprastai fluorescuojantys matomajame (VIS) diapazone, perduoda savo energiją priemaišoms, turinčioms mažesnį draustinės energijos tarpą. Tada, dėl kvantinio skaidymo reiškinio, fotoluminescencijos kvantinė išeiga (PLQY) gali viršyti vieneta, nes vienas didelės energijos fotonas gali būti paverstas dviem mažos energijos fotonais. Tokių kvantinio skaidymo medžiagų kūrimas yra labai patrauklus siekiant iš esmės pagerinti bendrą saulės elementų energijos konversijos efektyvumą arba kitų prietaisų, pvz., šviesos diodų [1], scintiliatorių [4] ir kt., veikimą.

Siekiant tikslesnių medžiagų kūrimo strategijų ir jų technologinių įgyvendinimų, skirtų patobulintai ar net naujai optoelektronikai, reikia geriau suprasti legiruotų perovskitinių medžiagų struktūrinių ir funkcinę savybių sąryšį. Taip pat, svarbu rasti aplinkai nekenksmingus, didelių medžiagų kiekių bei pigesnius paruošimo būdus. Nepaisant daugybės švino halogenidų perovskitų (LHP) sintezės ir legiravimo metodų, šių medžiagų struktūrinės ir fotofizinės savybės yra vis dar menkai suprantamos. Pavyzdžiui, tarp paskelbtų legiruotų perovskitų tyrimų, kyla ginčų dėl to, kaip lantanoido (Ln) jonai elgiasi perovskito gardelėje. Vienas iš kontraversiškų klausimų: ar  $\text{Yb}^{3+}$  jonai pakeičia  $\text{Pb}^{2+}$  jonus perovskito gardelėje [2] ar sudaro kvazi-2D perovskitines struktūras [1]?

Šiame darbe pristatome du paprastus mechanosintezės metodus iterbiu legiruotų cezio LHP (CLHP) miltelių paruošimui: sintezė su vandeniu ir sausa sintezė be tirpiklių. Taip pat, pateikiame išsamų paruoštų medžiagų struktūrinių ir optinių savybių tyrimą. Mechanosintezės technika yra pigi, nereikalauja daug pastangų ir suteikia galimybę gaminti didelius medžiagų kiekius. Perovskitinės miltelių medžiagos yra labai patrauklios pritaikymui scintiliatoriuose [4], o neseniai buvo parodyta, kad milteliai gali būti naudojami ir plonų perovskito plėvelių gamybai [5].

Mūsų iterbiu legiruoti CLHP milteliai pasižymi derinama eksitonine juosta VIS srityje ir stipria emisija NIR srityje, kuri atsiranda dėl kvantinio skaidymo proceso. Iterbis šioje sistemoje spinduliuoja ties maždaug 985 nm iš  $2F_{5/2} \rightarrow 2F_{7/2}$  elektroninio šuolio. Keisdami chloro ir bromo halogenidų santykį, paruošėme CLHP, kurių eksitoninė emisija yra 400–550 nm diapazone. Susintetinti  $\text{CsYb}_y\text{Pb}_{1-1.5y}(\text{Cl}_{1-x}\text{Br}_x)_3$  milteliai pasižymi

dideliu atsikartojamumu, lyginant su sukimo-dengimo iš tirpalo būdu suformuotomis plonomis plėvelėmis, bei stabiliu NIR PLQY iki 160 %, priklausomai nuo mišrių halogenidų koncentracijos. Iš struktūrinės analizės tyrimų nustatėme, kad iterbis yra įterpiamas į perovskito gardelę vietoj švino ir efektyviai surenka eksitoninę energiją. Tai matome 1 pav., kur VIS paveiksle kai kurių perovskito kristalų eksitoninė emisija yra visiškai užgesinta, kai tuo tarpu, tose pačiose vietose NIR paveikle iterbis pasižymi dideliu emisijos intensyvumu.



1 pav.  $\text{Yb}^{3+}$  legiruotų  $\text{CsPbCl}_3$  miltelių fluorescencinės mikroskopijos vaizdai VIS (eksitoninė perovskito emisija) ir NIR (iterbio priemaišų emisija) srityse. NIR kanalo intensyvumas yra iki trijų eilių didesnis nei VIS. Mastelio juosta yra 50  $\mu\text{m}$ . Nuotraukose pavaizduotos dirbtinės spalvos.  $\lambda_{\text{exc}} = 405 \text{ nm}$ .

*Reikšminiai žodžiai: perovskitas, iterbis, legiravimas iterbiu, kvantinis skaidymas.*

### Literatūra

- [1] A. Ishii & T. Miyasaka, JCP **153**, 194704 (2020).
- [2] D. M. Kroupa, et al., ACS Energy Lett. **3**, 2390 (2018).
- [3] T. J. Milstein, et al., Nano Lett. **18**, 3792 (2018).
- [4] K.A. Dagnall, et al. ACS Omega **7**, 20968–20974 (2022).
- [5] D. Prochowicz, et al., J Mater Chem A Mater **3**, 20772–20777 (2015).

### Padėka

Mokslinis tyrimas finansuojamas Europos socialinio fondo lėšomis pagal priemonę Nr. 09.3.3-LMT-K-712 „Mokslininkų, kitų tyrėjų, studentų mokslinės kompetencijos ugdymas per praktinę mokslinę veiklą“ (sutarties Nr. S-PD-22-4).