

Propiedades Ópticas de Perovskitas de Halogenuros Metálicos a Bajas Temperaturas

Daniel L. Gau ^a, Daniel Ramírez ^b, Isabel Galain ^c, Fernando Iikawa ^d, Gonzalo Riveros ^b, Patricia Díaz ^b, Javier Verdugo ^b, Gerard Núñez ^b, Susy Lizama ^b, Pamela Lazo ^b, Enrique A. Dalchiele ^a, Ivana Aguiar ^c, Carina Cabrera ^a, Enzo L. Spera ^a, Nicolás Molina ^a, C. Javier Pereyra ^a, Mariana Berruet ^e, Juan A. Anta ^f, Lidia Contreras-Bernal ^f, Antonio Riquelme ^f, Jesús Idigoras ^f, Ricardo E. Marotti * ^a.

^a Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Julio Herrera y Reissig 565, CC30, CP 11000, Montevideo, Uruguay.

^b Instituto de Química y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Valparaíso, Avenida Gran Bretaña 1111, Playa Ancha, Valparaíso, Chile.

^c Grupo de Desarrollo de Materiales y Estudios Ambientales, Área de Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, Av. General Flores 2124, Montevideo, Uruguay.

^d Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidad de Campinas, 13083-859 Campinas, São Paulo, Brazil.

^e División Electroquímica Aplicada, INTEMA, Facultad de Ingeniería,

CONICET-Universidad Nacional de Mar del Plata, Av. Colón 10850, B7606BWV, Mar del Plata, Argentina.

^f Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales, Universidad Pablo de Olavide, E-41013, Sevilla, España

* rmarotti@fing.edu.uy

Se estudian las propiedades ópticas a bajas temperaturas de las siguientes perovskitas inorgánicas de halogenuros metálicos: CsPbBr₃ y CsPbI₃. En el caso de perovskitas híbridas se demostraron celdas solares fotovoltaicas con eficiencia de conversión de energía comparable a las de celdas comerciales de Si [1]. Sin embargo las perovskitas híbridas tienen problemas de estabilidad, que son menos importantes en las perovskitas inorgánicas. El CsPbBr₃ fue preparado en forma de películas delgadas por una vía de tres etapas de bajo costo, siendo la primera de ellas electroquímica [2], que reduce los desechos tóxicos. El CsPbI₃ fue preparado por el método de hot-injection [3] que da lugar a nanopartículas cúbicas de 32 ± 5 nm de tamaño. Las propiedades ópticas fueron estudiadas en un crióstato entre 10 y 290 K. Para medir fotoluminiscencia se excitó con un LED que emite en torno a 365 nm.

Los espectros de absorción de las películas de CsPbBr₃ muestran un claro pico de absorción excitónico entre 2.3 y 2,4 eV, incluso a temperatura ambiente. Este pico se encuentra por debajo de la absorción entrebandas, incrementada por interacción coulombiana. En las nanopartículas de CsPbI₃ la aparición del pico de absorción excitónico se da claramente por debajo de los 220 K, y se encuentra entre 1.74 y 1.81 eV. Ajustes de la función de Elliott [4] permiten estudiar la dependencia con la temperatura de la energía del bandgap, la energía de ligación del excitón y el ancho del pico excitónico. La energía del bandgap aumenta con la temperatura de forma opuesta a lo que se observa en semiconductores tetragonales tradicionales. Se discuten posibles causas de esta discrepancia. Los espectros de fotoluminiscencia tienen un corrimiento Stokes de varias decenas de meV, que podrían indicar que su origen es en estados de defectos, pero el estudio del corrimiento Stokes, la intensidad de la fotoluminiscencia con la intensidad de iluminación y el ancho de los picos (dominado por interacción con fonones ópticos) con la temperatura, permite asegurar que también se debe a efectos excitónicos.

[1] M. A. Green, et al, Prog. Photovoltaic Res. Appl. 28 (2020) 629-638.

[2] D. Ramírez, et al, ChemElectroChem 7 (2020) 3961-3968.

[3] B. Tang, et al, Adv. Optical Mater. 2020 (2020) 2000498.

[4] R. J. Elliott, Physical Review 108, 6 (1957).