

КОНКУРС НА СОЗДАНИЕ НАУЧНО-УЧЕБНЫХ ГРУПП

Исследовательский проект Спектроскопия перспективных для фотовольтаики гибридных металл- органических перовскитов

НУГ: ГРУППА ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ ПЕРСПЕКТИВНОГО ФОТОВОЛЬТАИКА

БОЛДЫРЕВ К.Н.^{1,2}, АНИКЕЕВА В.Е.^{1,2}, СЕКТАРОВ Э.С.^{1,2}, СЛИНЬКО А.В.^{1,2}, ТРОПИНА Е.В.², АРХИПОВА А.А.²,
БЫКОВА Д.В.²

¹Институт спектроскопии РАН, г. Москва, г. Троицк

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва

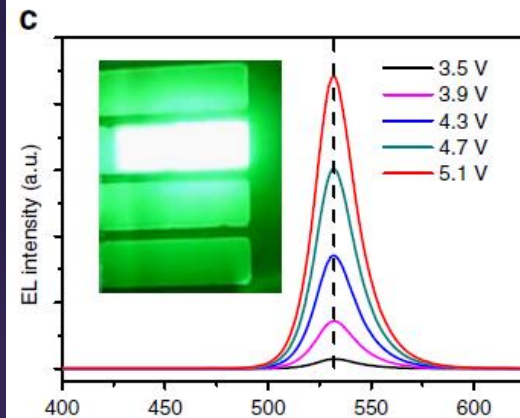
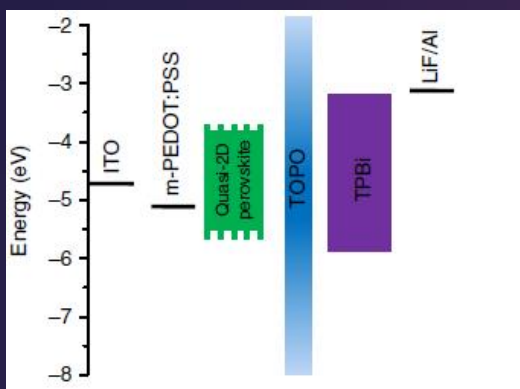


НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

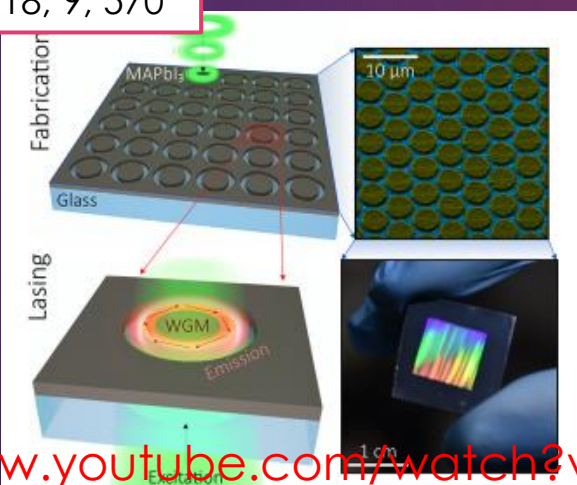
28 января 2021 г., Троицк

Гибридные металлорганические перовскиты: современные тенденции

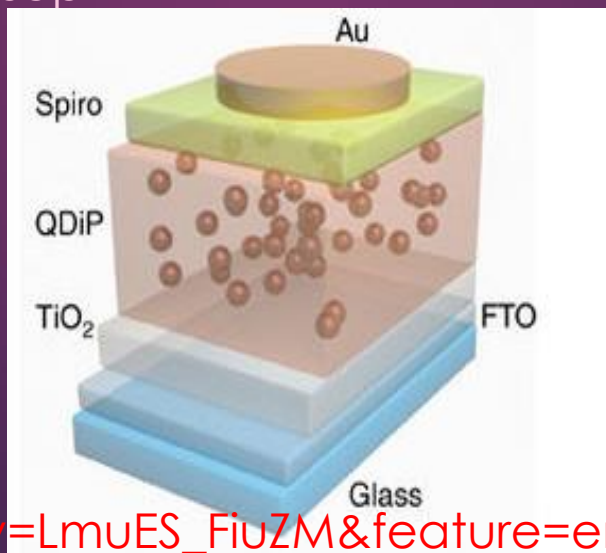
Светодиоды
Солнечные элементы
Лазеры



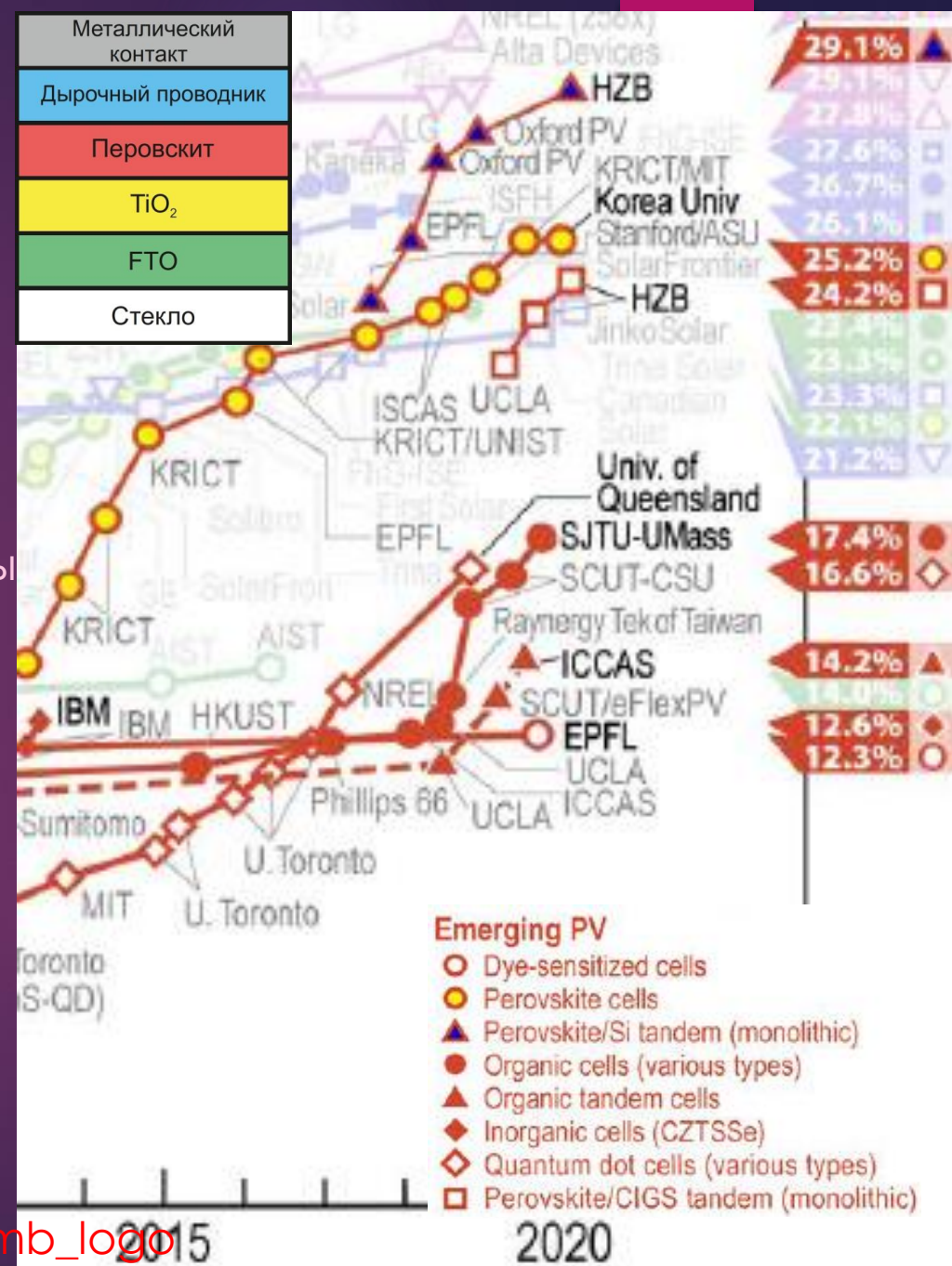
Nat. Comm. 2018, 9, 570



ACS Nano 2019, 13, 4140



Nat. Mater. 2014, 13, 476

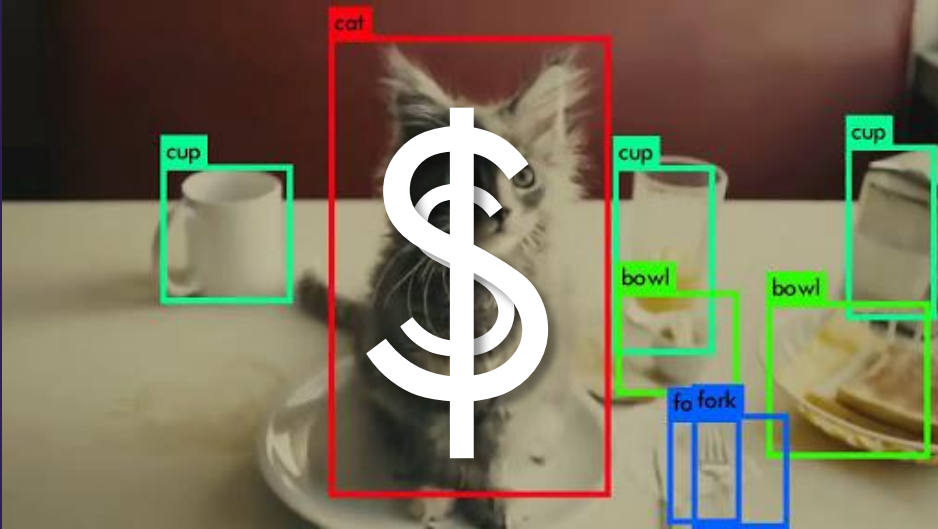


<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>

https://www.youtube.com/watch?v=LmuES_FiuZM&feature=emb_logo

КРЕМНИЕВЫЕ

ФОТОДЕТЕКТОРЫ ПОВСЮДУ



распознавание изображений



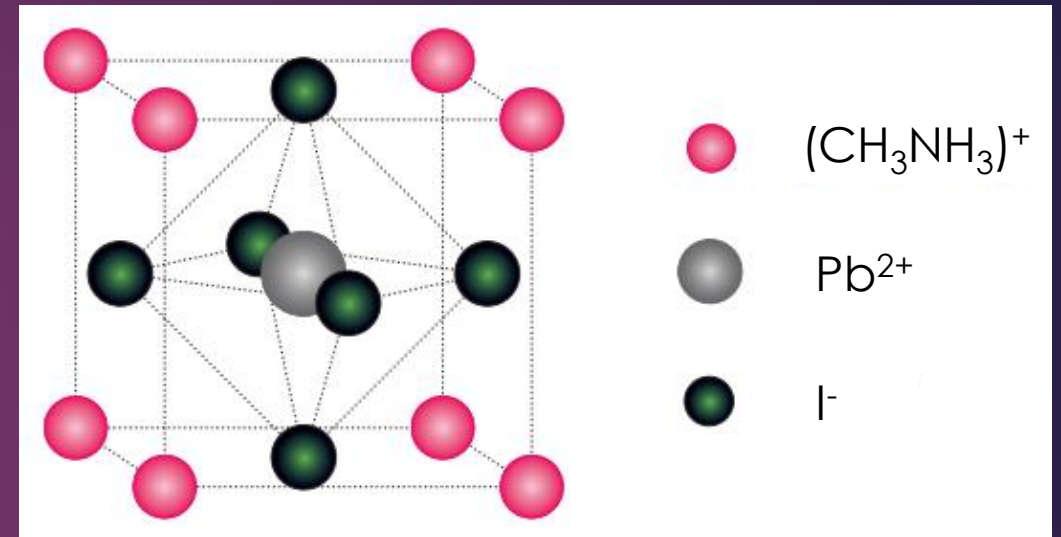
экологический мониторинг



оптические коммуникации

Уникальные физические и оптические свойства

- ▶ оптимальная ширина запрещенной зоны – $E_g = 1,5$ эВ
- ▶ высокий коэффициент поглощения (для солнечного спектра) – 10^5 см⁻¹
- ▶ большое время жизни носителей заряда
- ▶ высокая подвижность носителей
- ▶ большая длина диффузии



Структура перовскита метиламмония иодида свинца CH₃NH₃PbI₃.

Фотография синтезированных монокристаллов.

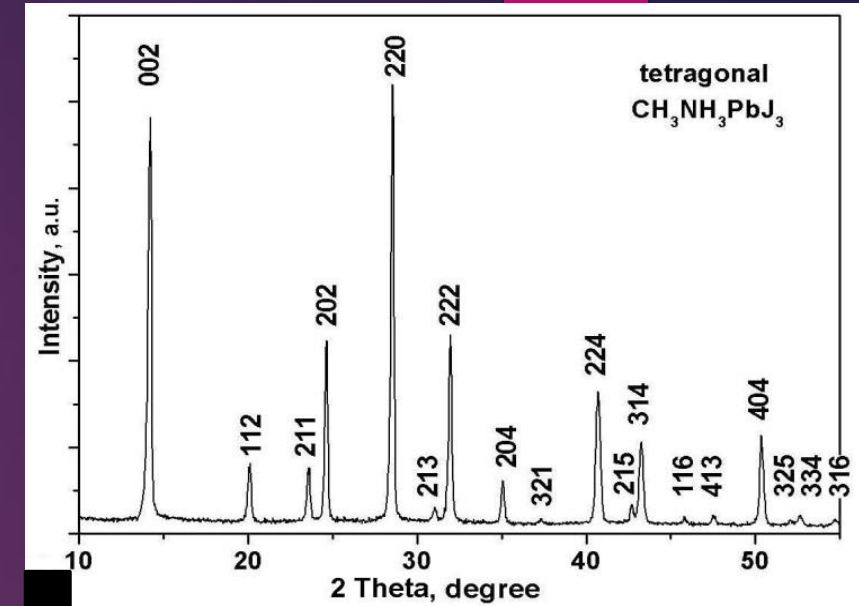
Синтез, состав, структура



- 1) Синтез $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$
 - 2) Синтез PbI_2
 - 3) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I} + \text{PbI}_2 \longrightarrow \text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$
- Два прекурсора

Пространственная группа:
 $I4/mcm$

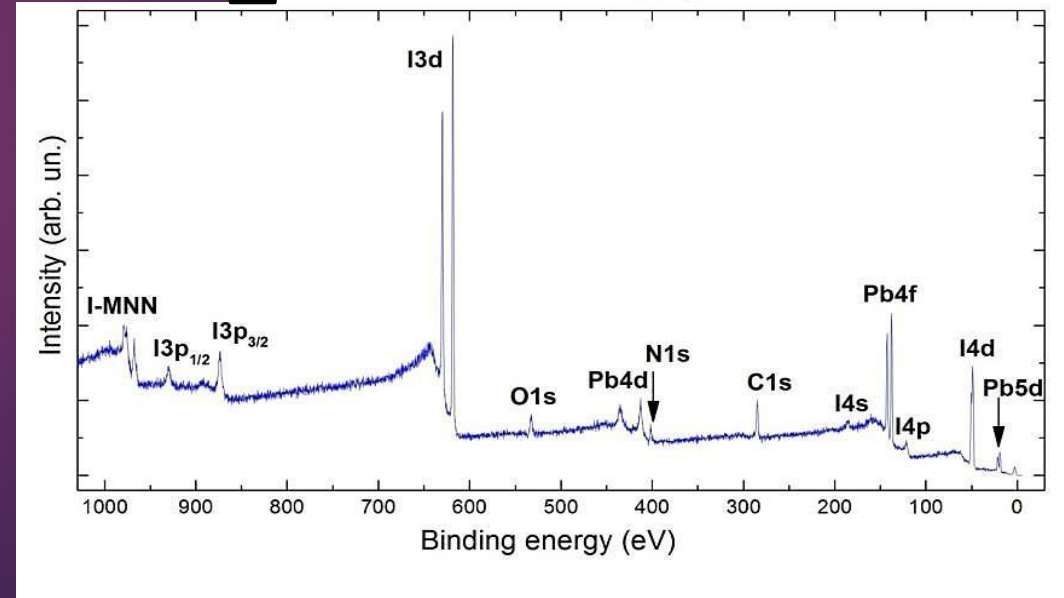
Параметры решётки:
 $a = 8.8743 \text{ \AA}$
 $c = 12.6708 \text{ \AA}$



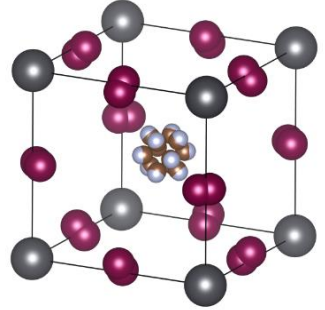
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$



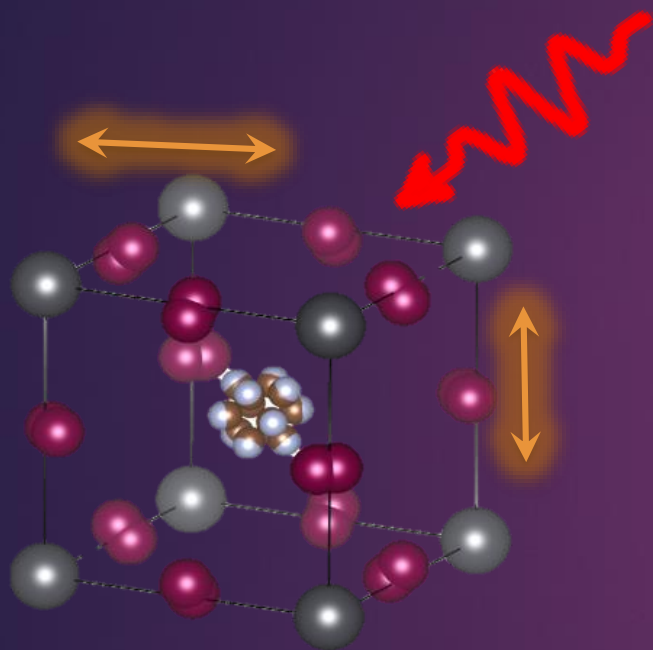
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$



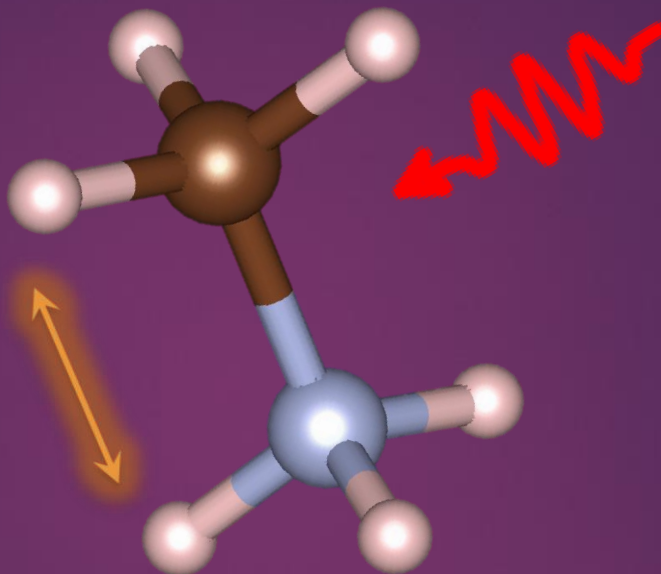
Структурные фазовые переходы

Структура	Кубическая	Тетрагональная	Ромбическая
Элементарная ячейка	 A 3D ball-and-stick model of a cubic unit cell. It shows a cube with atoms represented by spheres. Black spheres are at the corners, and red spheres are at the centers of the edges. A water molecule is shown in the center of the cube.		
Температура	$> 327 \text{ K}$	$327 \text{ K} < T < 161 \text{ K}$	$< 160 \text{ K}$

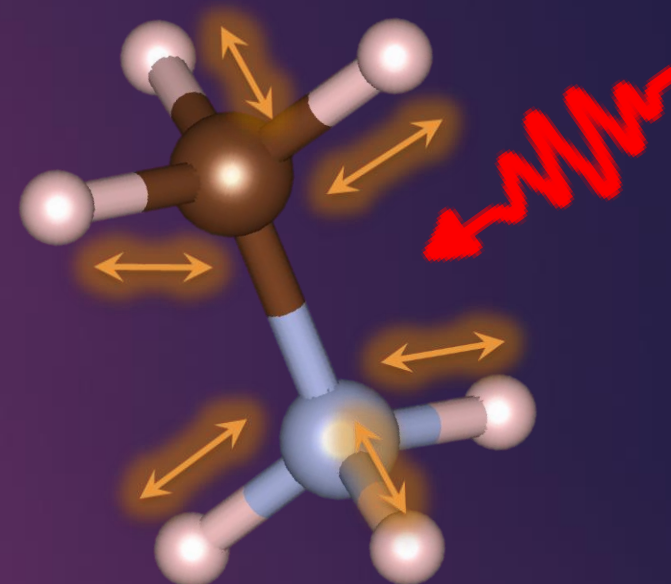
Диапазоны энергий колебаний



15 – 100 cm^{-1}



900 – 1600 cm^{-1}



3000 – 3200 cm^{-1}

Детали эксперимента



Bruker IFS 125HR Fourier Spectrometer

диапазон: 15 - 9500 cm^{-1}

разрешение: до 0.1 cm^{-1}

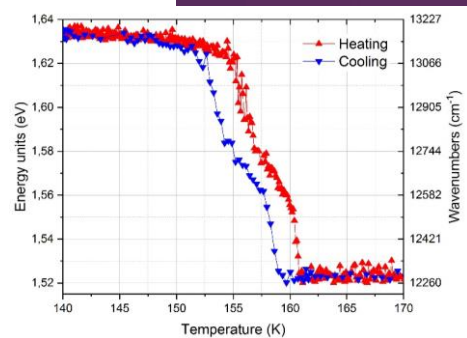
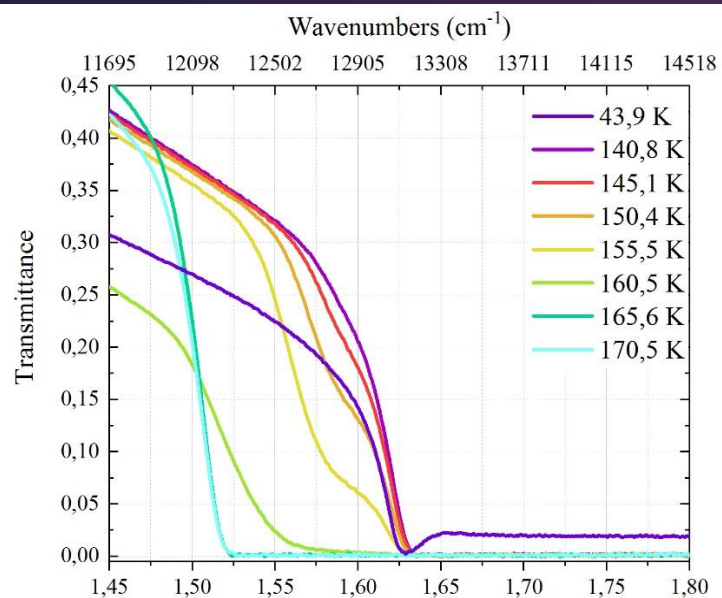
Криостат замкнутого цикла CryoMech ST403

диапазон температур: 3.5 – 300 К

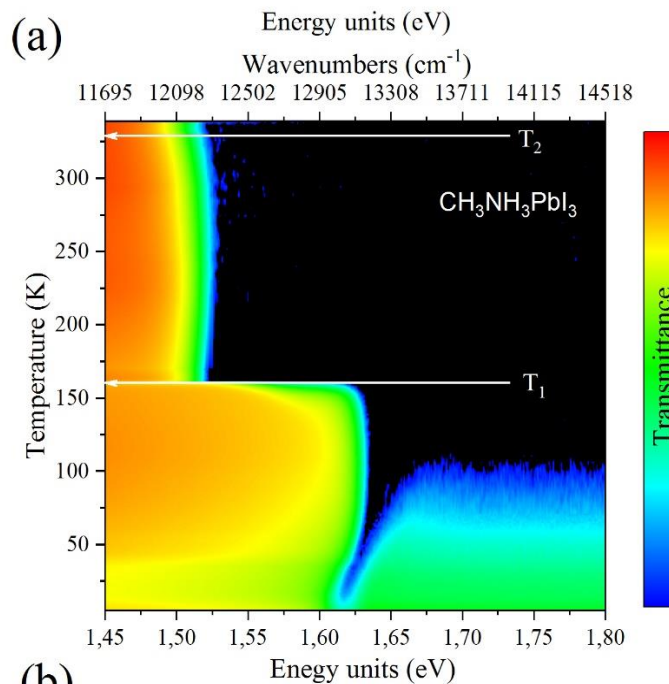
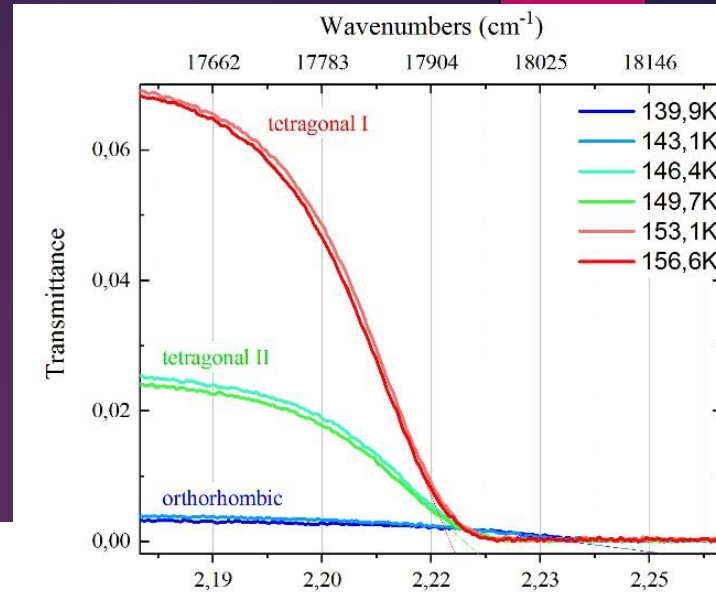


Образец на медном пальце
криостата

Спектры пропускания: смещение края поглощения при фазовом переходе



переходе



MAPbI₃

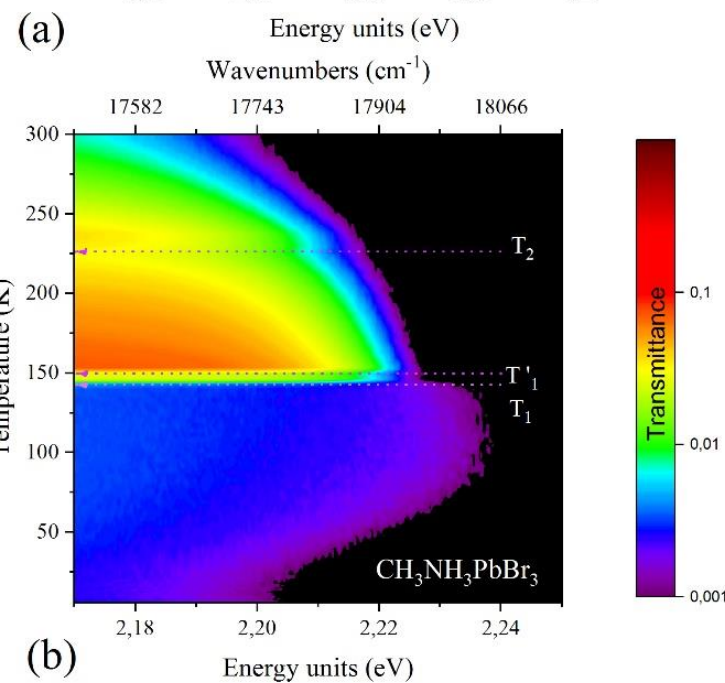


Ромбическая
 ↓
 160 K $\Delta E = 0,11$ эВ
 ↓
 Тетрагональная
 ↓
 330 K $\Delta E = 0,006$ эВ
 ↓
 Кубическая

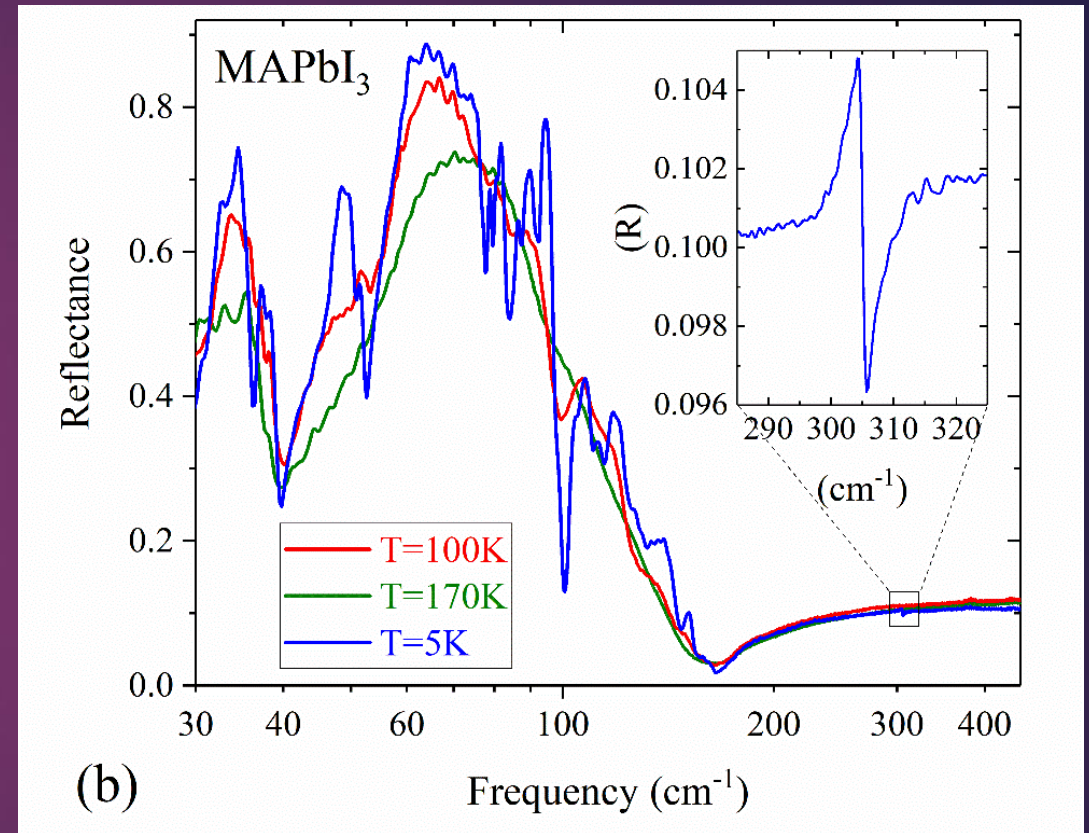
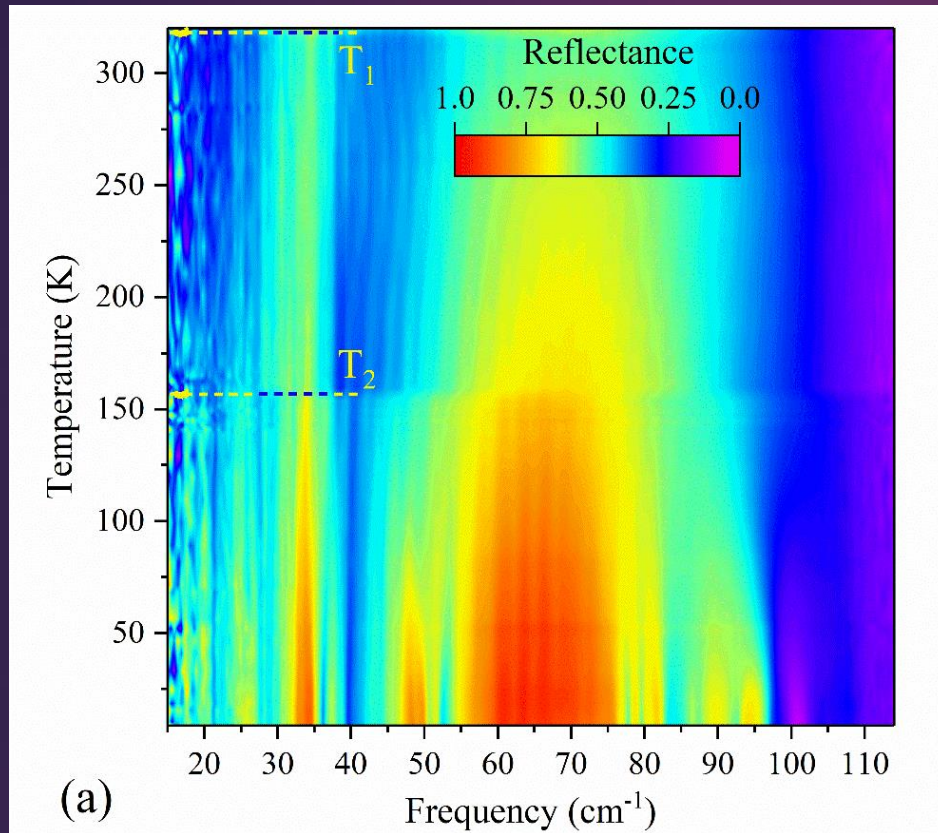
MAPbBr₃



Ромбическая
 ↓
 146 K $\Delta E = 0,012$ эВ
 ↓
 Тетрагональная I
 ↓
 153 K $\Delta E = 0,01$ эВ
 ↓
 Тетрагональная II
 ↓
 236 K $\Delta E = 0,002$ эВ
 ↓
 Кубическая

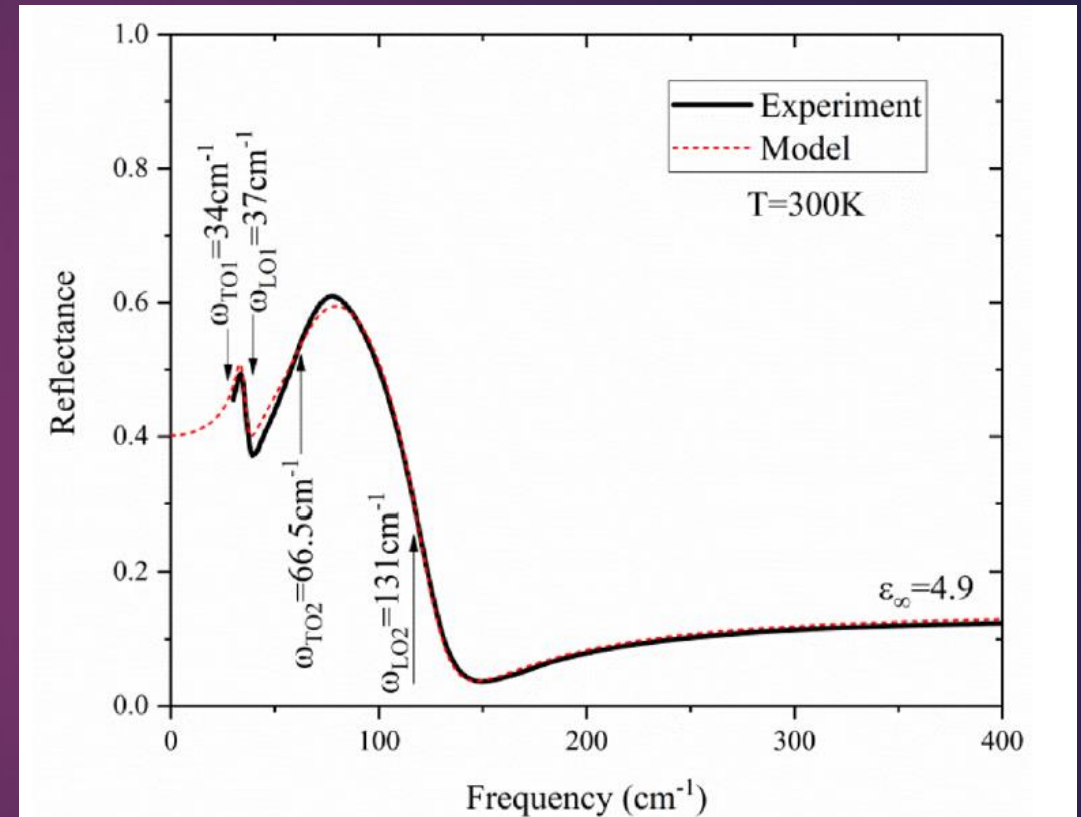
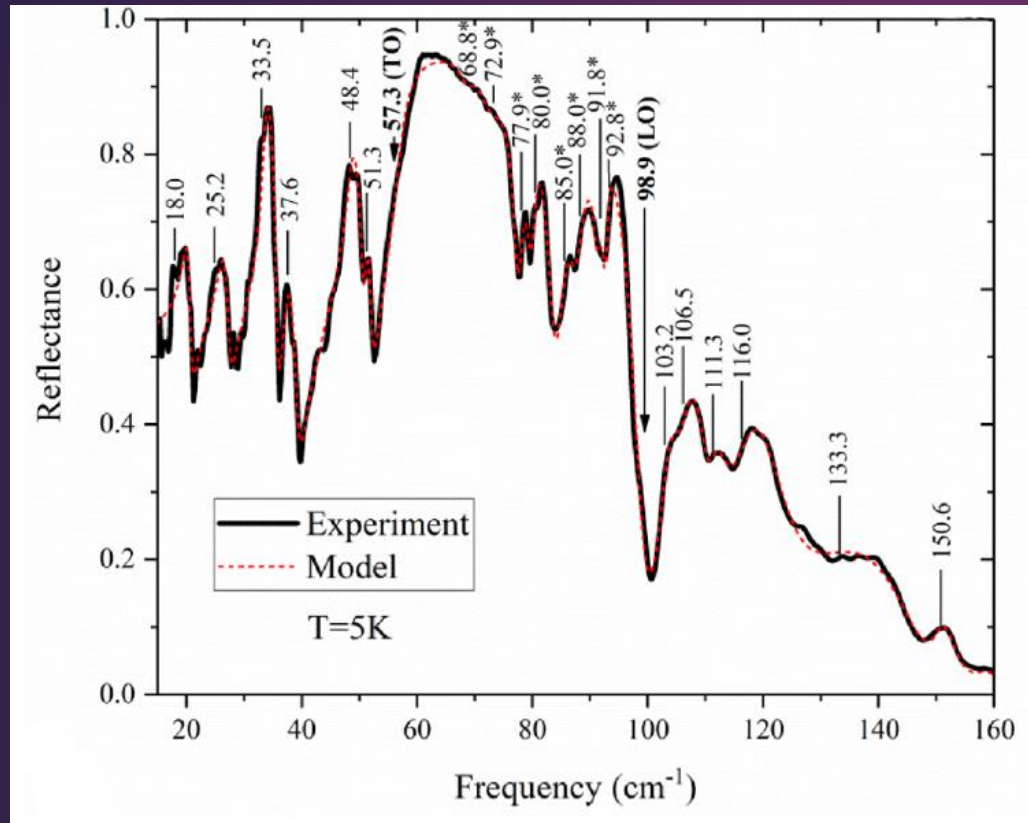


Спектры отражения в длинноволновой области: эксперимент



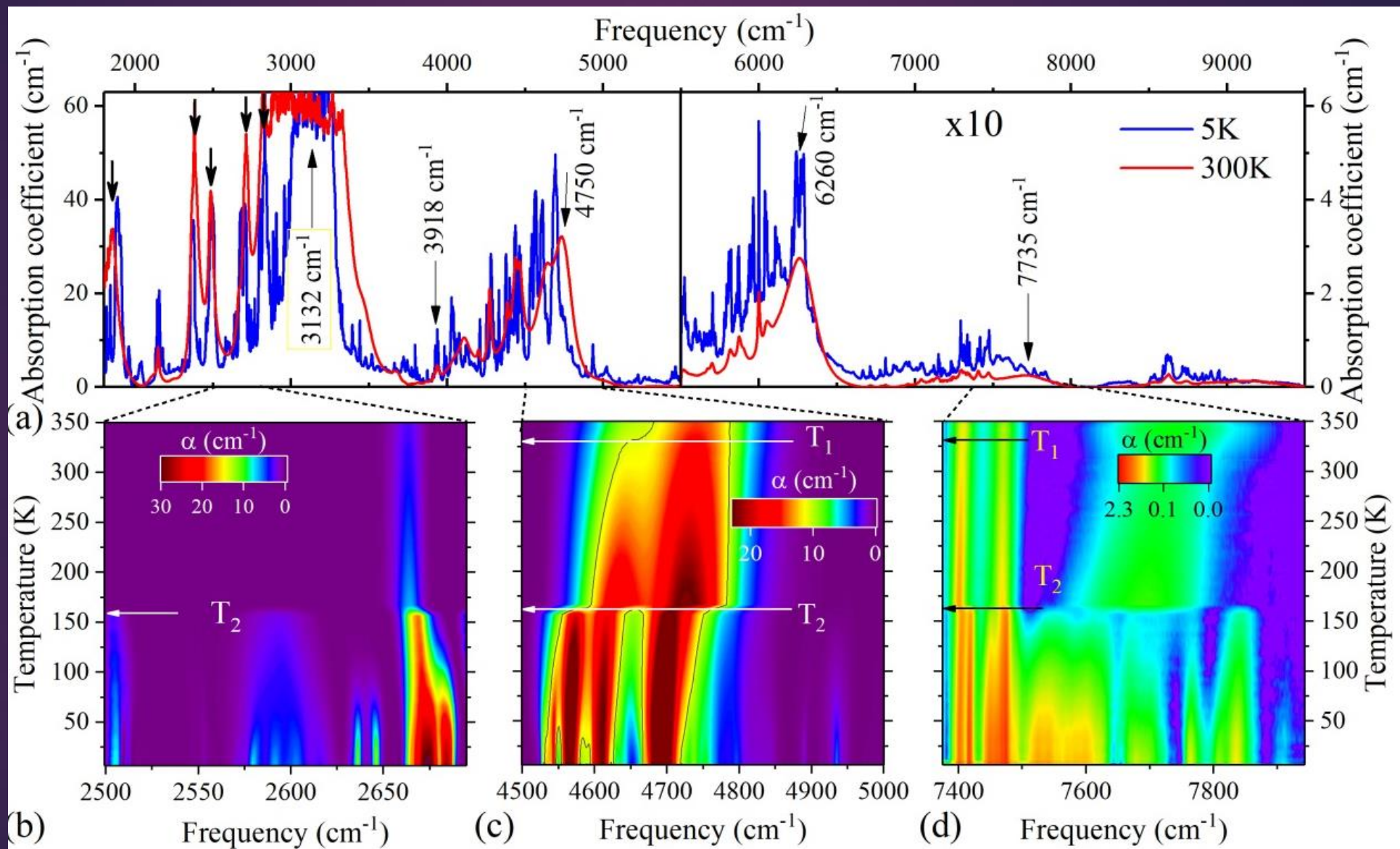
(a) Карта интенсивности отражения при различных температурах (b) спектры отражения для отдельных температур

Спектры отражения в длинноволновой области: моделирование

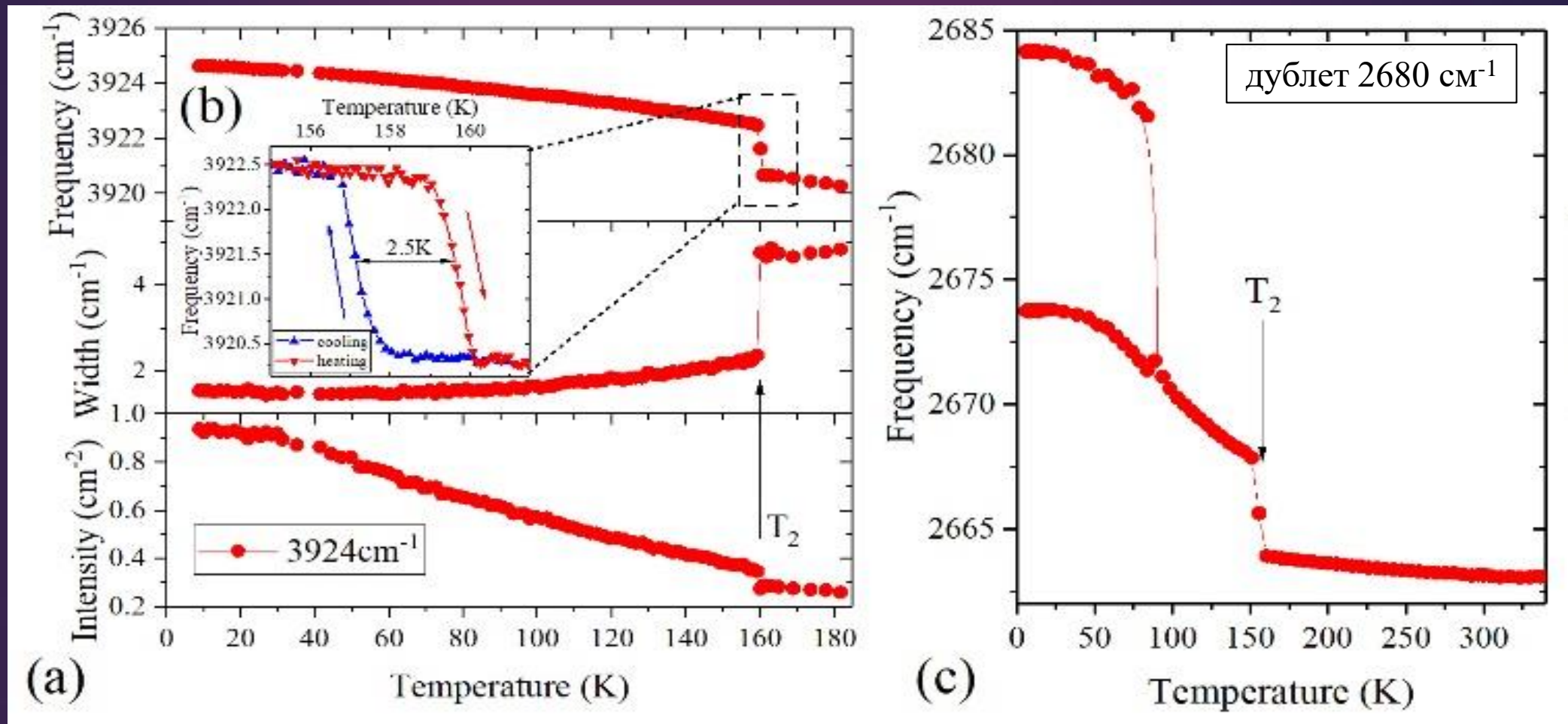


Экспериментальные и расчётные спектры отражения при (a) 5 К и (b) 300 К

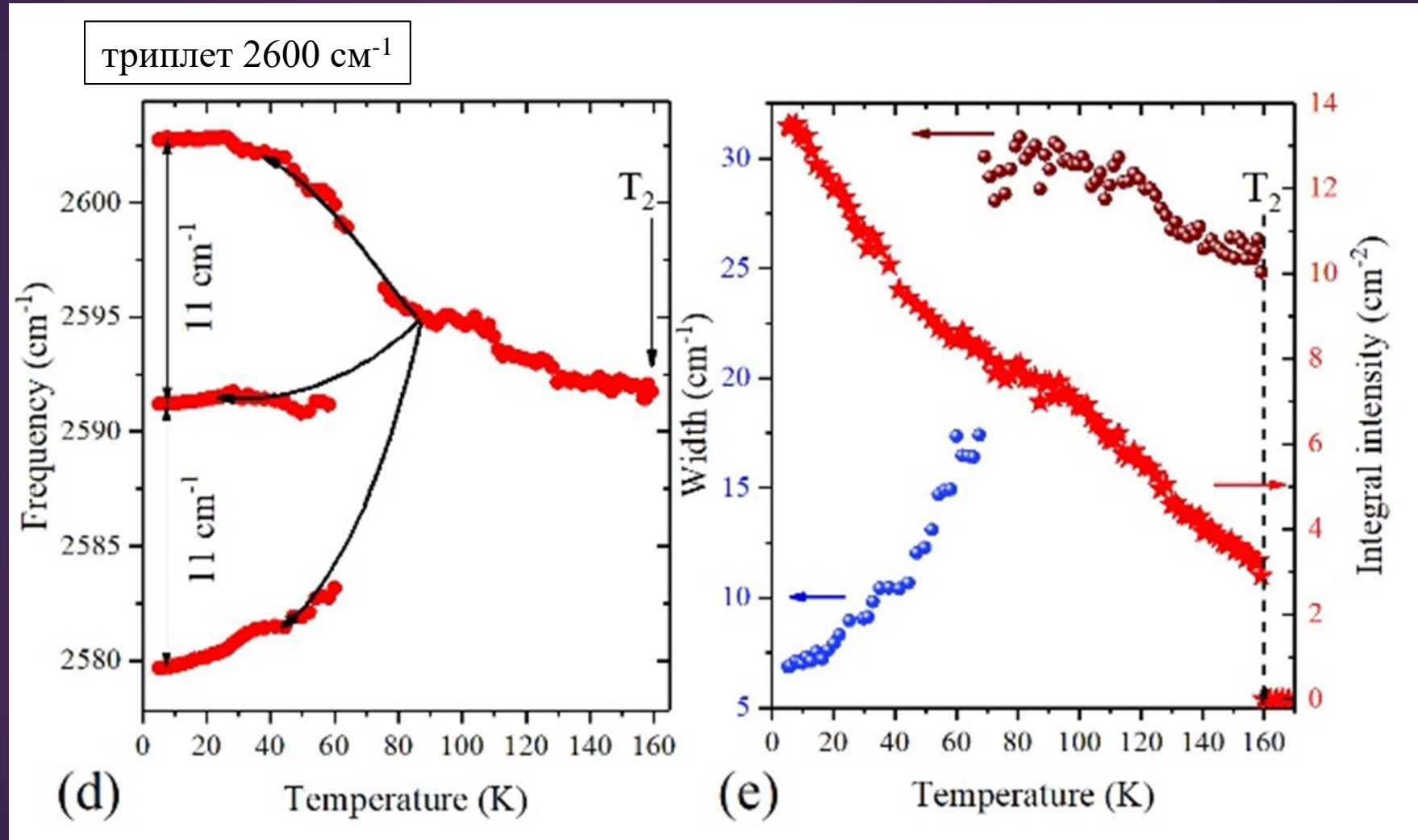
Спектры поглощения MAPbI_3

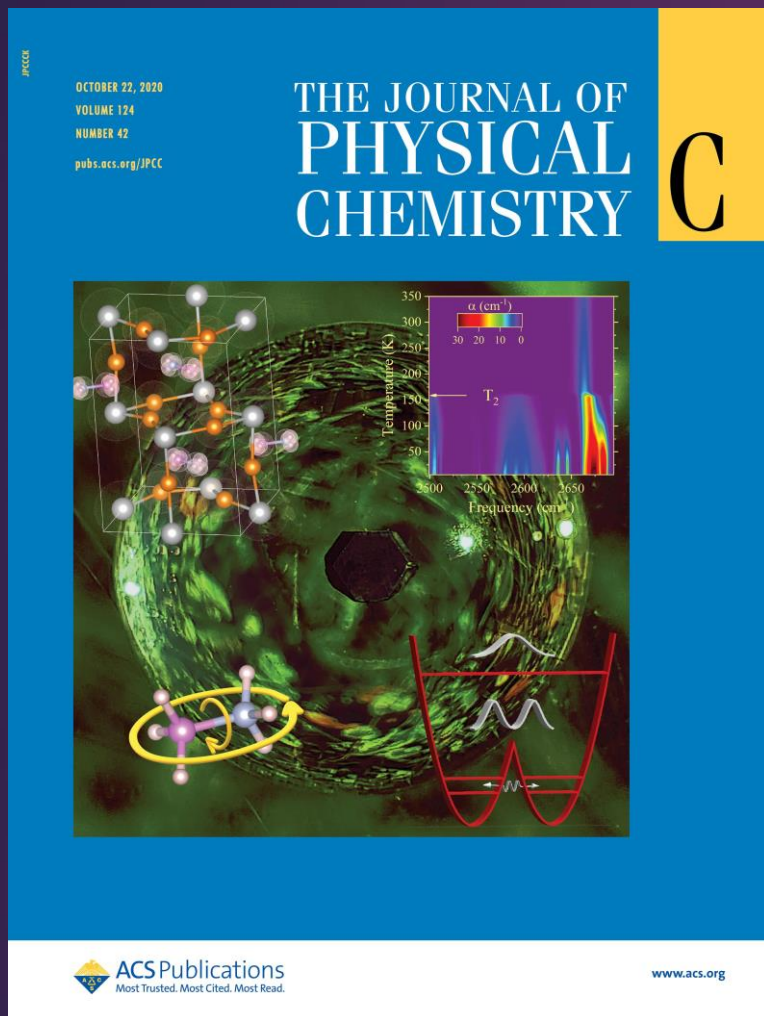


Особенности различных параметров оптических мод 1



Особенности различных параметров оптических мод 2





Infrared Spectra of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Hybrid Perovskite: Signatures of Phase Transitions and of Organic Cation Dynamics

Kirill N. Boldyrev, Vasilisa E. Anikeeva, Olga I. Semenova, Marina N. Popova

J. Phys. Chem. C 2020, 124, 42, 23307–23316

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

pubs.acs.org/JPCCC Article

Infrared Spectra of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Hybrid Perovskite: Signatures of Phase Transitions and of Organic Cation Dynamics

Kirill N. Boldyrev, Vasilisa E. Anikeeva, Olga I. Semenova, and Marina N. Popova*

Cite This: <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c06103> Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recommendations | Supporting Information

ABSTRACT: The high-resolution terahertz reflection and mid- and near-infrared transmission spectroscopic studies of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ hybrid perovskite single crystals are performed for the temperature range from 5 to 350 K. The observation of the torsional mode of the molecular cation (at 306 cm^{-1}) and of 12 other low-frequency modes not observed before is reported. Mode Grüneisen parameters for the strongest inorganic-cage modes are negative, which points to their interaction with a soft mode. Sharp peculiarities and the hysteresis take place in the multiphonon spectra at the phase transition from the tetragonal to the orthorhombic phase ($\sim 160\text{ K}$). Moreover, pronounced spectral changes are observed at $\sim 70\text{ K}$; they correlate with the transition to tunneling dynamics. A spectral line splitting at this temperature is tentatively attributed to the tunneling splitting.

Доклады на конференциях:

1. 2nd European conference on Novel Photonic, Optoelectronic and Electronic Materials (SPb-POEM2020)
2. XVIII Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления»
3. V International Conference on Metamaterials and nanophotonics (METANANO-2020)
4. XXVI Международная конференции «Оптика и спектроскопия конденсированных сред» (ОСКС-2020)
5. Moscow Autumn Perovskite Photovoltaics International Conference (МАРПИК-2020)
6. 18-ая Международная научная конференция-школа «Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной оптики: физические свойства и применение»
7. 13-й симпозиум с международным участием «Термодинамика и материаловедение», Российско-китайский семинар «Advance Materials and Structures»

«Разработка высокочувствительного фотодетектора на основе монокристалла гибридного металл-органического перовскита» – УМНИК-Фотоника 2020

Это что было сделано,
а предстоит...

Целью данной работы является исследование оптических, фотоэлектронных свойств и структуры гибридных металл-органических перовскитов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) в зависимости от температуры. Полученные результаты предполагается использовать при разработке высокочувствительных квантовых устройств на основе гибридных металл-органических перовскитов.

- а) исследование поляризационных зависимостей монокристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) при разных температурах;
- б) исследование колебательной структуры $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ по спектрам отражения в инфракрасном (ИК) и терагерцовом (ТГц) частотных диапазонах при температурах от 330 до 5 К;
- в) исследование фотоэлектронных свойств монокристаллов $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) по спектрам фотопроводимости в широком температурном диапазоне;
- г) исследование структурных фазовых переходов в $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) по спектрам пропускания в инфракрасном частотном диапазоне и вблизи края зоны поглощения;
- д) разработка высокочувствительного фотодетектора на основе монокристалла перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$).

Описание работы регулярно действующего (не менее одного в три недели) научного семинара с участием членов НУГ

Запланировано создание семинара «Перовскитная фотовольтаика».

Ориентировочное время проведения 15.00 по вторникам один раз в три недели в к. 205 Института Спектроскопии РАН.

Приблизительные темы первых семинаров:

1. Современные функциональные материалы с перовскитной структурой.
2. Перовскитные солнечные элементы и светодиоды.
3. Гибридная фотовольтаика.
4. Возбуждение носителей заряда и релаксация фотовозбуждения в металлоорганических перовскитах.
5. Спектроскопия высокого разрешения монокристаллов металл-органических перовскитов.
6. Вычислительные методы в исследованиях перовскитных полупроводниковых структур.

Сайт

Коллектив НУГ в обязательном порядке создает сайт НУГ на корпоративном портале НИУ ВШЭ, доступный для публичного просмотра и содержащий следующую информацию:

- ▶ о проекте, его целях, задачах, коллективе НУГ;
- ▶ о подготовленных в ходе работы над проектом публикациях;
- ▶ о научных семинарах НУГ с публичным представлением результатов работы по проекту, проводимых на регулярной основе (не менее одного в три недели) с участием студентов и аспирантов (с обязательным размещением на сайте НУГ текстов докладов, тезисов докладов, презентаций);
- ▶ о других семинарах, конференциях и иных научных мероприятиях с участием членов НУГ (с обязательным размещением на сайте НУГ текстов докладов, тезисов докладов, презентаций) с целью апробации результатов по проекту.

С требованиями к сайту можно ознакомиться на странице Научного фонда

<http://www.hse.ru/science/scifund/nug>

Помощь по созданию сайта могут оказать специалисты портала. По вопросам создания сайта обращайтесь, пожалуйста, в Информационно-редакторский отдел: portal@hse.ru

Ознакомиться с материалами портала можно по ссылке: <https://portal.hse.ru>

Конкретно с условиями создания сайта подразделения: <https://portal.hse.ru/im>

21-04-071	Ярская-Смирнова Елена Ростиславовна	ФСН	Социология (включая демографию и антропологию)	Факторы школьной инклюзии детей с инвалидностью в постсоветских странах: роль социального капитала	Инклюзивное общество: сравнительный анализ структурных условий и мнений инсайдеров в России и странах ближнего зарубежья
21-04-016	Болдырев Кирилл Николаевич	Факультет физики	Физика	Спектроскопия перспективных для фотовольтаики гибридных металл-органических перовскитов	Группа исследователей перспективного фотовольтаика
21-04-056	Мелентьев Павел Николаевич	Факультет физики	Физика	Визуализация единичных биомолекул на основе сильной оптической связи	Передовые оптические технологии в био-визуализации
21-04-041	Шаненко Аркадий Аркадьевич	МИЭМ	Физика	Самоорганизующиеся структуры в макроскопических квантовых системах	Моделирование самоорганизующихся структур в макроскопических квантовых системах
21-04-059	Власова Екатерина Александровна	ФГН	Филология и лингвистика	Язык современных академических текстов в свете корпусных данных:	Корпусные исследования академических

Пример сайта

22

miem.hse.ru/edu/ee/selforganized_structures/

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» → Учебные подразделения → Московский институт электроники и математики им. А.Н. Тихонова → Учебные подразделения → Департамент электронной инженерии → Научно-учебная группа «Моделирование самоорганизующихся структур в макроскопических квантовых системах»

Научно-учебная группа «Моделирование самоорганизующихся структур в макроскопических квантовых системах»

Происхождение сложных систем и вообще механизмы усложнения в природе – одна из наиболее интригующих и важных проблем в современной науке. Мощным инструментом для исследований в этом направлении служит сравнительное изучение спонтанных паттернов в разных системах.

Подобные паттерны известны во многих областях естественных наук, начиная с физики/химии и заканчивая биологией и геологией. В качестве примера можно привести формирование крупномасштабных космологических структур, возникновение песчаных дюн, узоры на шерсти ягуара или зебры, пространственные паттерны в колониях бактерий, причудливые распределения растительности (так называемые "ведьмины круги") в полусухих областях Намибии или Австралии и т.д.

Члены коллектива:

- Департамент электронной инженерии:
Профессор – [Шаненко Аркадий Аркадьевич](#)
Руководитель
- Департамент электронной инженерии:
Доцент – [Васенко Андрей Сергеевич](#)
Заместитель руководителя
- Департамент электронной инженерии:
Студент – [Демченко Александра Александровна](#)
Менеджер проекта, ответственная за ведение сайта

Паттерны Тьюринга на кожном покрове рыбы фугу

Узоры на коже рыбы императорский ангел

Раковина моллюска (Phylum Mollusca)

Мы используем файлы cookies для улучшения работы сайта НИУ ВШЭ и большего удобства его использования. Более подробную информацию об использовании файлов cookies можно найти [здесь](#), наши правила обработки персональных данных – [здесь](#).
Продолжая пользоваться сайтом, вы подтверждаете, что были проинформированы об использовании файлов cookies сайтом НИУ ВШЭ и согласны с нашими правилами обработки персональных данных. Вы можете отключить файлы cookies в настройках Вашего браузера.

15:52 28.01.2021

Пример сайта

23

Научно-учебная группа «Моде»

miem.hse.ru/edu/ee/selforganized_structures/

Контакты:

Руководитель группы – Шаненко Аркадий Аркадьевич, ashanenko@hse.ru

Ответственный за ведение сайта – Демченко Александра Александровна, aaademchenko_1@edu.hse.ru

магнитные характеристики сверхпроводящего состояния на фазовой диаграмме между стандартными типами сверхпроводимости.

В практическом плане стоят следующие задачи:

- ШАГ 1:** Создание численного кода для решений уравнений Богомольного, которые зависят от расположения сверхпроводящих вихрей;
- ШАГ 2:** Поиск оптимального распределения вихрей в зависимости от физических параметров системы путем имплементации алгоритма Метрополиса и использования пертурбативного подхода к решению микроскопических уравнений сверхпроводимости (разложения по малым параметрам, контролирующим отклонение от точки Богомольного на фазовой диаграмме);
- ШАГ 3:** Изучение свойств сверхпроводников между стандартными типами вдали от точки Богомольного, используя непertурбативные методы и подходы.

Описание методик и методов исследования:

Хорошо известно, что теория Гинзбурга-Ландау различает два стандартных типа сверхпроводимости: идеальный диамагнитный тип I и тип II, допускающий смешанное состояние. Смена одного типа на другой происходит, когда параметр Гинзбурга-Ландау κ (отношение глубины магнитного проникновения к характерной длине конденсата) проходит через критическое значение $\kappa = \kappa_0 = 0.71$.

Ключевым свойством, которое отличает эти типы, является вихревое взаимодействие: оно является отталкивающим для типа II и притягивающим для типа I. При $\kappa = \kappa_0$, называемой точкой Богомольного, вихри не взаимодействуют. Это является следствием самодуальности теории Гинзбурга-Ландау, которая в этой точке сводится к паре уравнений Богомольного первого порядка. Самодуальность Богомольного, впервые рассмотренная в контексте абелевой модели Хиггса, приводит к бесконечному вырождению различных вихревых конфигураций, откуда следует отсутствие вихревых взаимодействий. Эти самодуальные конфигурации включают в себя бесконечный набор нестандартных паттернов конденсата-поля и их суперструктуры.

Сервис предназначен только для отправки сообщений об орфографических и пунктуационных ошибках.

Мы используем файлы cookies для улучшения работы сайта НИУ ВШЭ и большего удобства его использования. Более подробную информацию об использовании файлов cookies можно найти [здесь](#), наши правила обработки персональных данных – [здесь](#). Продолжая пользоваться сайтом, вы подтверждаете, что были проинформированы об использовании файлов cookies сайтом НИУ ВШЭ и согласны с нашими правилами обработки персональных данных. Вы можете отключить файлы cookies в настройках Вашего браузера.

Пример сайта

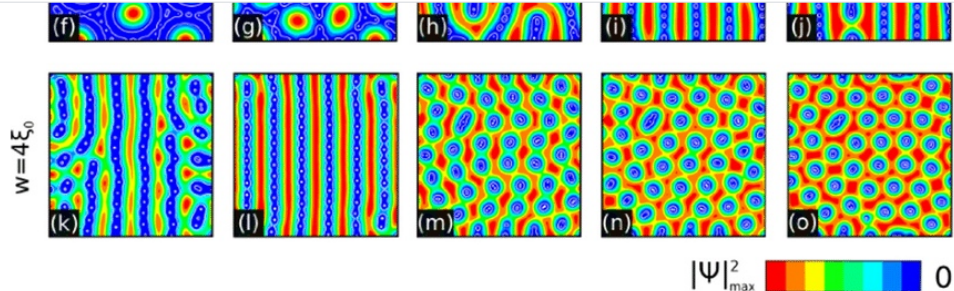
Научно-учебная группа «Моде...»

miem.hse.ru/edu/ee/selforganized_structures/

Контакты:

Руководитель группы – Шаненко Аркадий Аркадьевич, ashanenko@hse.ru

Ответственный за ведение сайта – Демченко Александра Александровна, aademchenko_1@edu.hse.ru



$w = 4\xi_0$

$|\Psi|_{\max}^2$ 0

Распределение конденсата Куперовских пар в сверхпроводящей плёнке (вихри видны как белые точки или кружки на синем фоне почти подавленного конденсата)
W. T. Cordoba-Camacho et al, Phys. Rev. B 94, 054511 (2016)

Ожидаемые научные результаты:

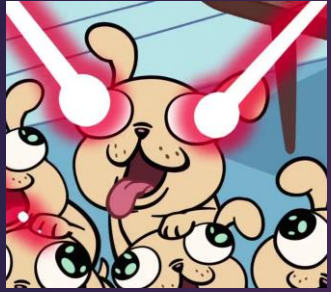
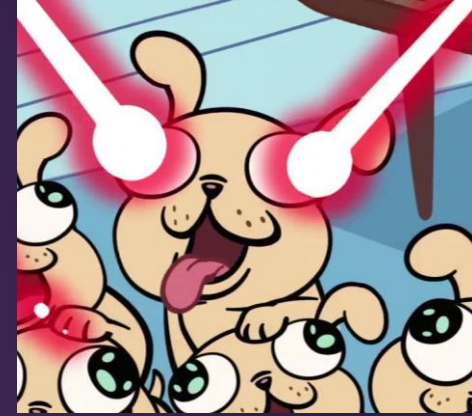
Анализ спонтанных паттернов требует адекватных теоретических подходов, которые должны выходить за пределы теории Гинзбурга-Ландау. Поскольку теоретическое моделирование, основанное на полном микроскопическом формализме затруднено, мы предполагаем две параллельных стратегии.

- С одной стороны, будет использоваться расширенный формализм Гинзбурга-Ландау, который учитывает лидирующие поправки к теории Гинзбурга-Ландау при разложении микроскопических уравнений по малому параметру $\tau = 1 - T/T_c$.
- В этом случае теоретическое моделирование спонтанных структур в сверхпроводниках между типами I и II основано на решении уравнений самодуальности Богомольного с последующим нахождением пертурбативных поправок к этим решениям путём использования методов молекулярной динамики и алгоритма Метрополиса.
- Реализация данной стратегии будет опираться на методологию, развитую руководителем проекта профессором Шаненко А. А и его соавторами в предыдущих работах, опубликованных в научной периодике.
- В дополнение, будут проведены соответствующие исследования за пределами пертурбативного анализа микроскопических уравнений. Эта часть проекта будет опираться на экспертизу и предыдущие работы второго опытного участника нашей НУГ профессора Васенко А. С.

Мы используем файлы cookies для улучшения работы сайта НИУ ВШЭ и большего удобства его использования. Более подробную информацию об использовании файлов cookies можно найти [здесь](#), наши правила обработки персональных данных [здесь](#). Продолжая пользоваться сайтом, вы подтверждаете, что были проинформированы об использовании файлов cookies сайтом НИУ ВШЭ и согласны с нашими правилами обработки персональных данных. Вы можете отключить файлы cookies в настройках вашего браузера.

НУГ ВШЭ
Елена: Здравствуйте, Кажется, мы с Дашей немножко множк...

И напоследок:



Puppies

Perovskite

for Prospective

by Infrared

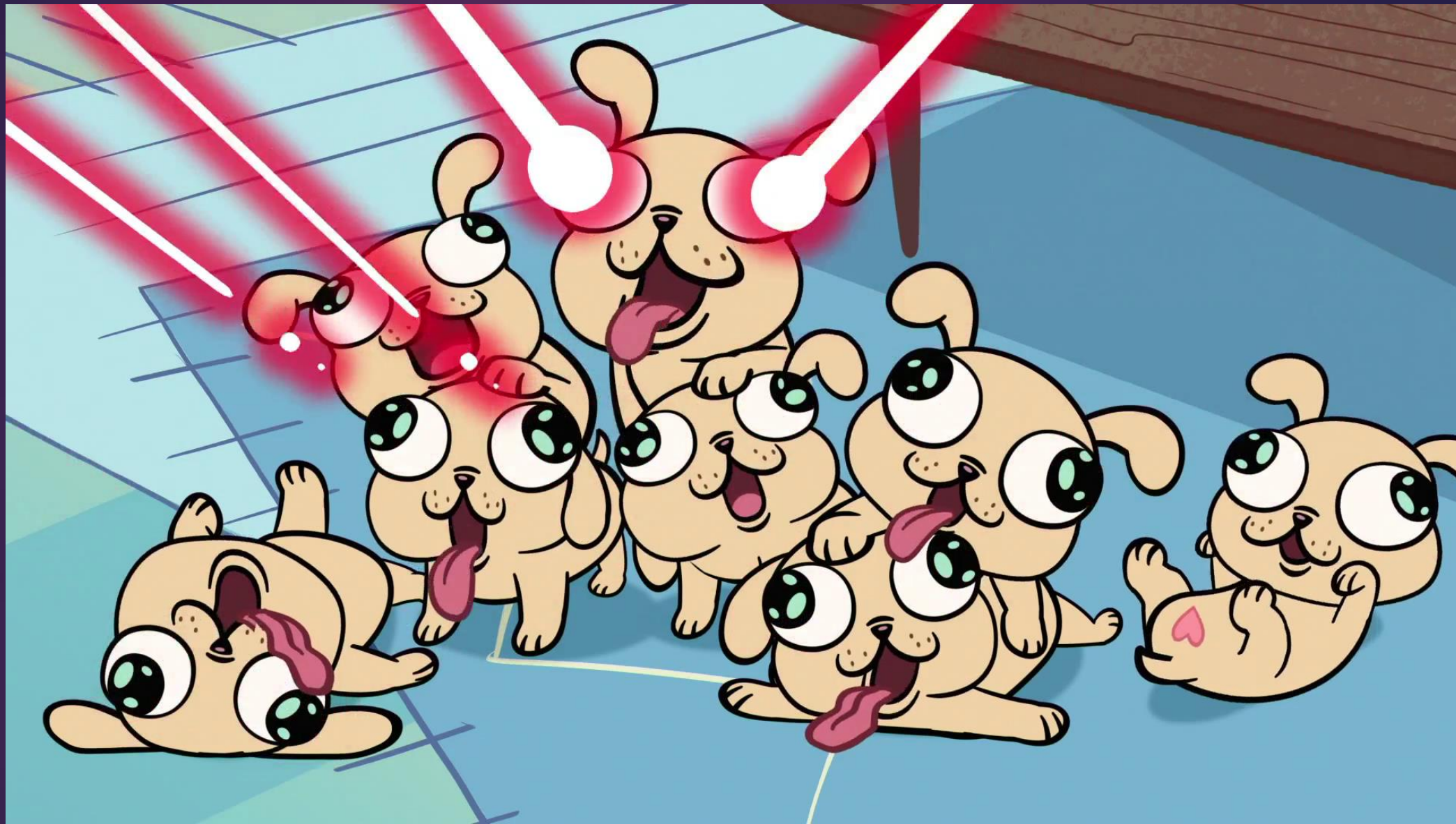
Spectroscopy

Understanding

Photovoltaics

and Electronic





Ну или так:

- ▶ PARIS (Perovskite Affluent research by infrared spectroscopy)

Спасибо за внимание!

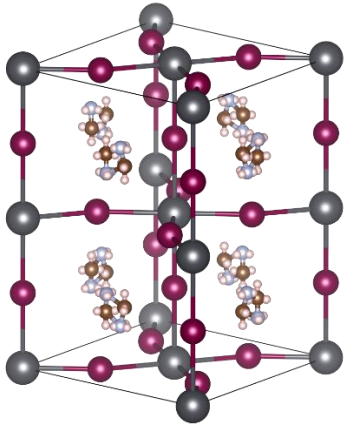
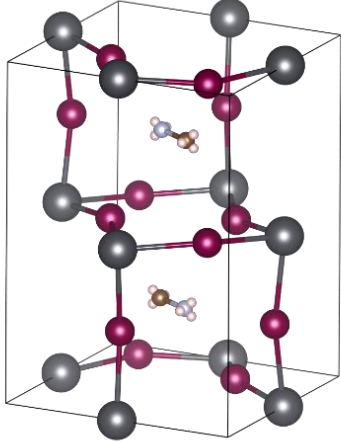
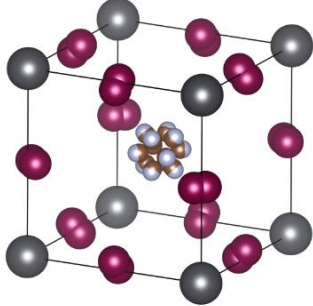
Василиса Аникеева

e-mail: anikeeva.ve@phystech.edu

Заключение

- ▶ Впервые исследованы спектры поглощения и отражения высокого разрешения в ИК диапазоне в широком температурном интервале.
- ▶ Продемонстрирована чувствительность многофононных спектров к структурным фазовым переходам и вращательной динамике молекулярного катиона CH_3NH_3^+ .
- ▶ Было обнаружено 13 новых низкочастотных мод.
- ▶ При температуре T_2 фазового перехода остаются только две моды неорганической решётки (30 и 60 см^{-1}). При этом их частоты претерпевают резкий сдвиг.
- ▶ Обнаружено уширение колебательных линий выше температуры фазового перехода T_2 .
- ▶ При высокотемпературном фазовом переходе из тетрагональной в кубическую фазу значительных изменений в спектрах не наблюдается.

Структурные фазовые переходы

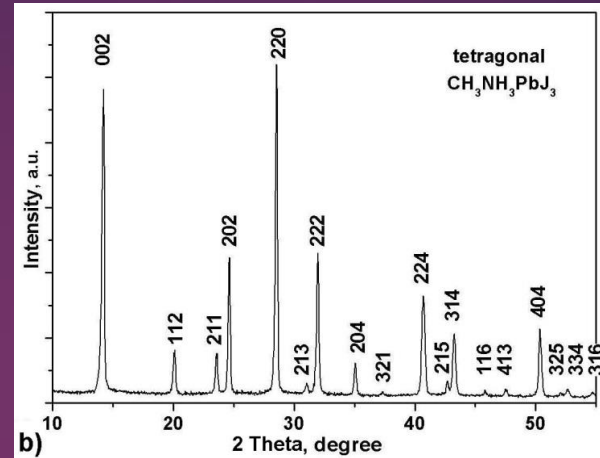
Структура	Кубическая	Тетрагональная	Ромбическая
			
Температура	$> 327 \text{ K}$	$327 \text{ K} < T < 161 \text{ K}$	$< 160 \text{ K}$
Пространственная группа	$Pm\bar{3}m$	$I4/mcm$	$Pnma$
Параметры решётки	$a = 6.32(85) \text{ \AA}$	$a = 8.85(5) \text{ \AA}$ $c = 12.65(9) \text{ \AA}$	$a = 8.86(1) \text{ \AA}$ $b = 8.58(1) \text{ \AA}$ $c = 12.62(0) \text{ \AA}$

Synthesis, composition and structure

- 1) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ synthesis
 - 2) PbI_2 synthesis
- } Two precursors
- 3) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I} + \text{PbI}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$



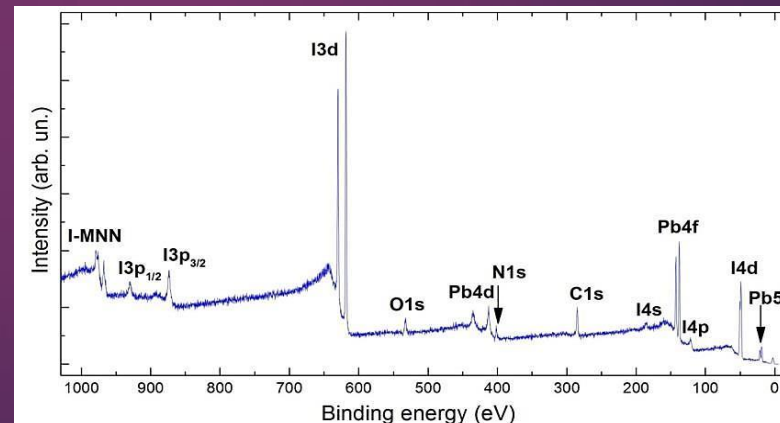
Synthesized single crystals.



XRD pattern of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ crystals.

Space group:
 $I4/mcm$

Lattice constant:
 $a = 8.8743 \text{ \AA}$, $c = 12.6708 \text{ \AA}$



XPS spectrum of the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ single crystal surface.

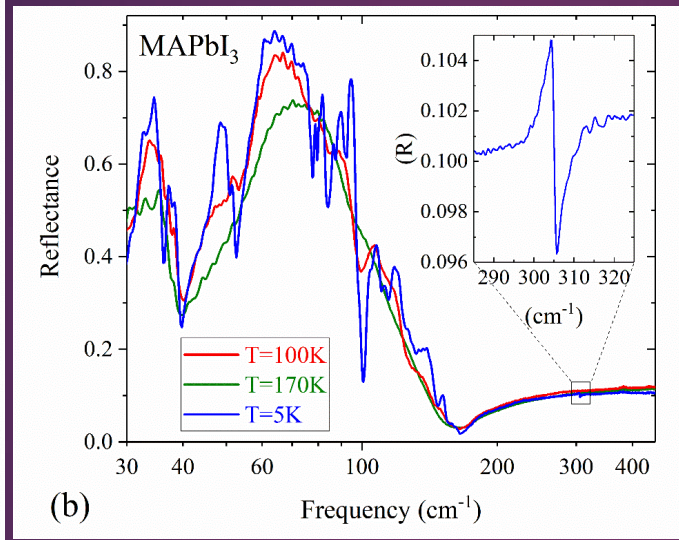
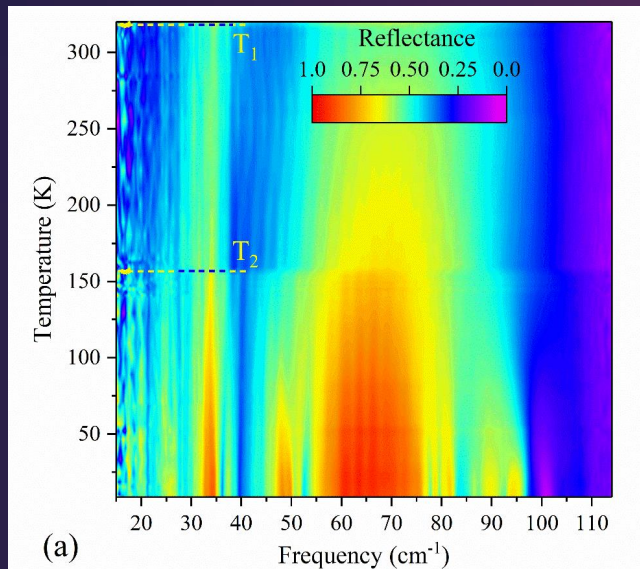
References

- [6] V. E. Anikeeva, O. I. Semenova and O. E. Tereshchenko, J. Phys.: Conf. Ser. 1124, 041008 (2018).
- [7] O.I. Semenova, E.S. Yudanova, N.A. Yeryukov, et. al. Journal of Crystal Growth. 462, 45-49 (2017).
- [8] E. S. Yudanova, T. A. Duda, O. E. Tereshchenko, O. I. Semenova, Journal of Structural Chemistry. 58, 8, 1567-1572 (2017).

Reflection spectra in the FIR region

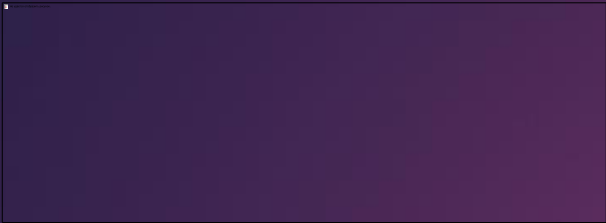
The frequencies ω_{TO} and ω_{LO} of the optical modes, observed in the far-IR spectra of MAPbI₃ at 5 K.

$$\epsilon_{\infty} = 4.9, \epsilon_0 = 27.5.$$



N	Ref. (1), 10 K ω_{TO} (cm ⁻¹)	This work, 5 K		Tentative assignment
		ω_{TO} (cm ⁻¹)	ω_{LO} (cm ⁻¹)	
1	17	20.5	20.7	PbJ ₆ octahedra twist
2	22	26.6	27.3	PbJ ₆ octahedra twist
3	30	33.5	35.9	Pb-I-Pb rock
4	35	37.5	38.8	Pb-I-Pb rock
5	47	48.6	51.2	Pb-I-Pb bend
6	59	57.5	99.2	Pb-I-Pb stretch
7		78.0*	77.3	Pb-I-Pb bend
8		80.0*	79.6	Pb-I-Pb bend, CH ₃ NH ₃ ⁺ libr
9		85.9*	83.9	Pb-I-Pb bend, CH ₃ NH ₃ ⁺ libr
10		91.5*	91.3	CH ₃ NH ₃ ⁺ translation
11		92.8*	92.5	CH ₃ NH ₃ ⁺ translation
12		103.0	105.2	CH ₃ NH ₃ ⁺ libr/transl
13		106.3	110.0	CH ₃ NH ₃ ⁺ libr/transl
14		111.2	113.9	CH ₃ NH ₃ ⁺ rotation along C-N
15		116.0	126.1	
16		133.2	144.3	CH ₃ NH ₃ ⁺ libr/transl
17		150.1	152.6	CH ₃ NH ₃ ⁺ libr/transl
18		305.06	305.12	CH ₃ NH ₃ ⁺ torsion

Reflection spectra of a MAPbI₃ single crystal (a) presented as the intensity map in the wave number – temperature axes and (b) at several selected temperatures.


$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{i=1}^N \frac{\omega_{0i}^2 f_i}{\omega_{0i}^2 - \omega^2 + i\omega\gamma_i} .$$

<https://reffit.ch/wp-content/uploads/2018/10/Manual.pdf>

Here N is the total number of the oscillators, ω_{0i} , f_i , and γ_i are the transverse optical (TO) frequency, the oscillator strength, and the damping constant of the i -th oscillator, respectively, and ε_{∞} is the dielectric constant at high frequencies (note, that it contains the electronic contribution). Longitudinal frequencies ω_{LOi} were found as maxima of the loss function