

Моделирование зонных структур политипов CsPbX₃ с плотнейшими упаковками различной слойности

Бучинский Владимир Витальевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: buchinskiy.vova@gmail.com

На сегодняшний день солнечная энергетика является очень динамично развивающейся областью альтернативной энергетики. Одними из наиболее перспективных, а потому изучаемых материалов, способных усовершенствовать солнечные элементы, являются галогениды свинца с общей формулой APbX₃ (где A⁺ - метиламмоний, формамидиний, Cs⁺; X - I⁻, Br⁻) с перовскитоподобной структурой. Такие материалы являются полупроводниками и используются в качестве светопоглощающих слоев в солнечных элементах. Однако, несмотря на сравнительно простой (растворный) метод их получения, при кристаллизации таких фаз в различных диапазонах температуры нередко образуются побочные фазы, - так называемые дельта-политипы, исследование свойств которых на сегодняшний день в литературе не является исчерпывающим. Настоящая работа посвящена исследованию взаимосвязи структура-ширина запрещенной зоны для различных дельта-политипов галогенидов свинца с формулой APbX₃ теоретическими методами. Были сконструированы все возможные политипы состава CsPbI₃ и FAPbI₃ со слойностью плотнейших упаковок от 2 до 11. В результате исследования показана зависимость доли гранных сочленений октаэдрических пустот, заполненных свинцом, и ширины запрещенной зоны в таких материалах. Таким образом, в рамках проделанной работы впервые сделан вывод всех возможных гексагональных политипов CsPbI₃ и FAPbI₃ с плотнейшими упаковками различной слойности (от 2 до 11); с использованием метода теории функционала электронной плотности рассчитаны их зонные структуры и выявлены корреляции состав-структура-свойство.