

**Теоретическое моделирование структуры и свойств твердого раствора
гибридных перовскитов MAPbI_3 - MAPbBr_3**

Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич

Машарипов Голиб Абдукажорович

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет наук о материалах, Кафедра междисциплинарного материаловедения, Москва, Россия

E-mail: golibmasaripov@gmail.com

Крупнейшим прорывом последних лет в области современной солнечной энергетики стало появление перовскитных солнечных элементов, использующих в качестве материала светопоглощающего слоя гибридный галогенидный перовскит с общей формулой ABX_3 ($\text{A} = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$, $(\text{NH}_2)_2\text{CH}^+$, CH_6N_3^+ , Cs^+ , Rb^+ ; $\text{B} = \text{Pb}^{2+}$, Sn^{2+} ; $\text{X} = \text{Cl}^-$, Br^- , I^-). Наибольший интерес представляют перовскиты смешанного катионного состава и анионного состава, поскольку рекордные значения КПД были получены именно для солнечных элементов на основе перовскитов, представляющих собой твёрдые растворы. Кроме того, данные соединения демонстрируют повышенную стабильность по сравнению с перовскитами, в структуре которых присутствуют однозарядные катионы и анионы только одного вида.

Расчеты [1] с использованием гибридных методов теории функционала плотности показали, что немаловажным фактором в изменении электронной структуры MAPbI_3 является способ распределения примесных ионов Br^- по кристаллографическим позициям в сверхъячейке. В настоящей работе приведены результаты теоретического исследования влияния упорядочения ионов Br^- и I^- в твердом растворе MAPbI_3 - MAPbBr_3 на локальную структуру и свойства. Расчеты осуществлялись в рамках полуэмпирического подхода с применением разработанного согласованного набора межатомных потенциалов. С использованием программы Vinar [2] были сконструированы $4 \times 4 \times 4$ сверхъячейки со структурой ромбического и тетрагонального MAPbI_3 - MAPbBr_3 с различной степенью упорядочения ионов Br^- и I^- во всем диапазоне составов. Показано, что степень упорядочения анионов в твердом растворе влияет на его локальную структуру и геометрические характеристики.

Источники и литература

- 1 Kim J. et al. Systematic analysis of the unique band gap modulation of mixed halide perovskites // Physical Chemistry Chemical Physics. 2016. V. 18. №6. Pp. 4423-4428.
- 2 Еремин Н.Н. и др. Выбор ячейки с оптимальной атомной конфигурацией при моделировании неупорядоченных твердых растворов // Физика и химия стекла. 2008. Т. 34. №1. С. 11-23.