

FIE 压力对钙钛矿 MSnX_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 的影响：密度泛函理论研究

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33427.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

FIE 压力对钙钛矿 MSnX_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 的影响：密度泛函理论研究。 论文标题：Impact of pressure on perovskite MSnX_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$): A density functional theory study

期刊：Frontiers in Energy

作者：Shuhua Yuan, Mohib Ullah, Ammar M. Tighezza

发表时间：10 Oct 2024

DOI：10.1007/s11708-024-0970-4

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

文章内容

在探索可持续能源解决方案的进程中，研究人员揭示了压力对锡基卤化物钙钛矿性质的重要影响，这一发现有望显著提升太阳能电池的效率。电子科技大学的Shuhua Yuan研究团队全面分析了在不同压力条件下， MSnX_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}; \text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) 的结构、电学和光学性质。

研究人员采用体积优化方法研究了具有空间群的立方体形式的锡基卤化物钙钛矿 LiSnCl_3 、 LiSnBr_3 、 LiSnI_3 、 NaSnCl_3 、 NaSnBr_3 和 NaSnI_3 的结构性质。为了确定这些性质，采用了PBE-GGA方法。利用Birch-Murnaghan状态方程建立了能量与单元胞体积之间的关系。利用Tran和Blaha修正的钙钛矿的Becke-Johnson势 (tbj) 泛函计算了在零压和高压下， LiSnCl_3 、 LiSnBr_3 、 LiSnI_3 、 NaSnCl_3 、 NaSnBr_3 和 NaSnI_3 的能带结构和态密度 (DOSs)，包括总态密度 (TDOSs) 和偏态密度 (PDOSs)。

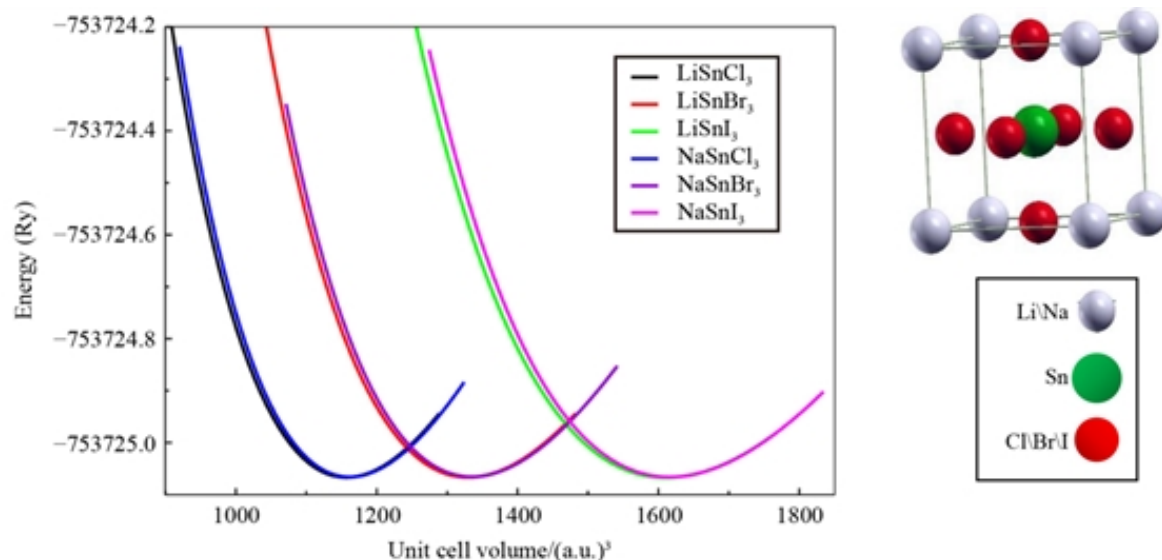


图1 MSnX3 (M=Li, Na; X=Cl,Br,I) 晶胞体积与立方晶胞能量的关系

研究表明，这些化合物的晶格常数随着压力的增加而减小，当阴离子从Cl替换为I时，变化更为显著。电子分析显示，这些材料在压力下仍保持直接带隙特性，尽管随着压力和阴离子尺寸的增加，带隙会变窄。值得注意的是，Li/NaSnCl₃、Li/NaSnBr₃和Li/NaSnI₃在超过5GPa的压力下可能表现出金属行为。光学研究表明，静态介电常数和光吸收（尤其是在可见光谱中）的压力诱导增强，特别是在可见光谱范围内，突出了这些钙钛矿材料在太阳能电池应用中的潜力。折射率随压力增加，表明材料密度更高，光学性能得到增强。这一全面分析表明了这些基于锡的卤化物钙钛矿在先进光电和光伏技术中的潜力。

文章信息

Impact of pressure on perovskite MSnX₃ (M=Li, Na; X=Cl, Br, I): A density functional theory study

Shuhua Yuan, Mohib Ullah, Ammar M. Tighezza

Abstract:

This study explores the structural, electronic, and optical properties of tin-based halide perovskites, MSnX₃ (M=Li, Na; X=Cl, Br, I), under varying pressure conditions. Using volume optimization and the Perdew-Burke-Ernzerhof generalized gradient approximation (PBE-GGA) method, it analyzes these perovskites in their cubic pm3m phase. The findings reveal that the lattice constants of these compounds decrease as pressure increases, with more pronounced changes observed when anions are substituted from Cl to I. The electronic analysis shows that these materials maintain their direct band gap nature under pressures, although the band gaps narrow with increasing pressure and larger anion sizes. Notably, Li/NaSnCl₃, Li/NaSnBr₃, and Li/NaSnI₃ may exhibit metallic behavior at pressures exceeding 5 GPa. Optical studies reveal significant pressure-induced enhancements in static dielectric constant and optical absorption, especially in the visible spectrum, highlighting the potential of these perovskites for solar cell applications. The refractive index increases with pressure, indicating a higher material density and enhanced optical performance. Additionally, the extinction coefficient and electron energy loss function provide insights into the energy absorption and scattering characteristics, which are crucial for improving the efficiency of optoelectronic devices. This

comprehensive analysis underscores the potential of these tin-based halide perovskites for advanced optoelectronic and photovoltaic technologies.

Cite this article:

Shuhua Yuan, Mohib Ullah, Ammar M. Tighezza. Impact of pressure on perovskite MSnX_3 ($\text{M} = \text{Li}, \text{Na}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$): A density functional theory study. *Front. Energy*,

<https://doi.org/10.1007/s11708-024-0970-4>

Full text:

二维码





Frontiers *in* Energy

- 中国工程院院刊
- 国际化投审稿和发布平台
- 免费语言润色, 无版面费
- 在线优先出版, 快速进入SCI数据库
- 全方位宣传推广, 提升论文可见度

欢迎了解期刊更多信息

主编团队

主 编



黄 震
中国工程院院士
上海交通大学



周守为
中国工程院院士
中海油集团



苏义脑
中国工程院院士
中石油集团工程
技术研究院



彭苏萍
中国工程院院士
中国矿业大学

副 主 编



张久俊
加拿大三院院士
福州大学



Radenka Maric
美国科学促进会会士
美国康涅狄格大学



Nicolas Alonso-Vante
法国普瓦捷大学



巨永林
上海交通大学

期刊特点

1. 国际化投审稿平台ScholarOne方便快捷。
2. 严格的同行评议(Peer Review)。
3. 免费语言润色，有力保障出版质量。
4. 不收取作者任何费用。
5. 不限文章长度。
6. 审稿周期：第一轮平均30。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发