سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

مطالعه ی ابتدا به ساکن پایداری ساختارهای (CsPb(I۰.۵X۰.۵)۳ (X=Cl,Br

محل انتشار:

نخستین همایش فناوری های نوین در انرژی و مواد (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

صفیه نظری دولیسکانی – دانشجوی مقطع دکتری رشته ی فیزیک حالت جامد سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکدهفیزیک و شتابگرها

یاور تقی پور آذر – عضو هیئت علمی سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

علی رضا درودی – عضو هیئت علمی سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده فیزیک و شتابگرها

خلاصه مقاله:

مواد نیم رسانای CsPbI۳ در فاز مکعب دارای گاف انرژی مناسب به عنوان جاذب نور برای استفاده در سلولهای خورشیدی می باشند. اما این ساختارها در دماهای پایین دارای پایداری خیلی پایین می باشند. در این پژوهش، با استفاده نظریه تابعی چگالی، تاثیر حضور ناخالصی های برم و کلر که نیمی از جایگاههای ید را اشغال کرده اند، بر خواص الکترونی ساختار بدون نقص بررسی گردیده است. بنابر نتایج به دست آمده ساختارهای شبکه ای شامل نقص در سطح پایین تری از انرژی قرار می گیرند و به دلیل تشکیل پیوندهای قوی تر در نزدیکی باند ظرفیت گاف انرژی در توافق با نتایج تجربی افزایش می یابد. هم چنین نتایج محاسبات نشان می دهند که جرم موثر الکترون در ساختار شامل نقص کوچکتر و به عبارتی به دلیل موبیلیتی بالاتر، انتقال الکترون در این ساختارها سریع تر است.

کلمات کلیدی:

سلول خورشیدی، پروسکایت، نقص، گاف انرژی، جرم موثر.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1696633