

Cálculo de propiedades electrónicas para las perovskitas libres de plomo $\text{Cs}_2\text{AgIn}(\text{Br}_x\text{Cl}_{1-x})_6$: Un estudio basado en la teoría funcional de la densidad

Ruiz Vergara Catalina^{1*}, Loyola Canales Claudia^{1†}

¹Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Ciencias Físicas, Universidad Andrés Bello, Sazié 2212 Piso 7, Santiago, Chile

*catalina.victoria57@gmail.com, †claudia.loyola@unab.cl

Introducción

Presentamos el cálculo de propiedades electrónicas de la perovskita doble $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ cuya estructura es cúbica y pertenece al grupo espacial 225, Fm-3m, [1], que llamaremos prístina, Figura 1, y de la misma dopada con Bromo, $\text{Cs}_2\text{AgIn}(\text{Br}_x\text{Cl}_{1-x})_6$, siendo los porcentajes a dopar 4%, 8%, 12% y 16%. La prístina, y sus estructuras dopadas, están siendo estudiadas con el fin evaluar si estas pueden ser utilizadas como semiconductores en celdas solares, lo anterior debido a que las propiedades electrónicas y ópticas que poseen las perovskitas hacen que sea un material de gran interés para este fin [2]. En particular, esta perovskita es llamativa por ser libre de plomo, es decir, no tóxica.

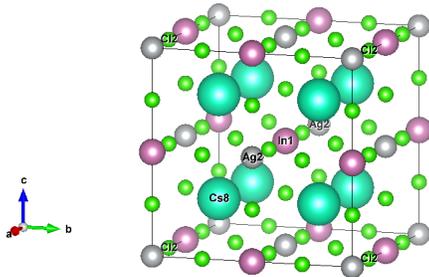


Figura 1: Estructura $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$. Los colores celeste, gris, morado y verde indican Cesio, Plata, Indio y Cloro, respectivamente. Contiene 40 átomos: 8 Cesio, 4 Plata, 4 Indio y 24 Cloro

Los cálculos computacionales se han realizado con el código VASP [3] utilizando pseudopotenciales GGA tipo PBESOL. Con esto se han obtenido la estructura de bandas y la densidad de estados electrónica parcial y total de cada una de las estructuras. Nuestros resultados muestran que, a medida que se realiza el dopaje de la estructura prístina, y este va en aumento, el parámetro de red se incrementa mientras que el valor del band gap disminuye, lo que nos muestra un primer indicio de que estas estructuras podrían ser utilizadas como semiconductores en celdas solares tipo perovskita.

Agradecimientos:

Las simulaciones fueron realizadas utilizando el cluster FENIX <http://www.matbio.cl>

Referencias

- [1] H. Arnold *et al*, Springer A, 689-691, 2005.
- [2] Nam-Gyu Park, Materials Today, 18,2,65 - 72,2015.
- [3] Kresse, G. and Hafner, J., Phys. Rev. B **47**, 558-561, 1993.