



## بررسی خواص الکترونی و تراپردی $\text{CsSnBr}_3$ : مطالعه اصول اولیه

صفیه نظری<sup>\*</sup>، باور تقی‌پور آذر، زعفر ریاضی، نادیا بابایی

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۱۳۶۵-۸۴۸۶، تهران-ایران

\*Email: snazari@aeoi.org.ir

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۱۱/۱۰ تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۱/۳/۱۸

### چکیده

نانو کریستال  $\text{CsSnBr}_3$  نسبت به سایر پروسکایت‌های فاقد سرب به دلیل سنتز راحت و ارزان، عملکرد طولانی مدت و پایداری بهتری که از خود نشان می‌دهد یک گزینه مناسب برای استفاده در آشکارسازهای نوری جفت‌شده می‌باشد. در این پژوهش با استفاده از تئوری تابعی چگالی در گام اول خواص الاستیکی و الکترونی  $\text{CsSnBr}_3$  به دست آورده شد. در نهایت با استفاده از کمیت‌های محاسبه شده، حاصل ضرب تحرک‌پذیری و زمان واهلش  $\mu\tau$  برای هر دو حامل الکترون و حفره محاسبه گردید. بنابر نتایج به دست آمده، هر دو حامل دارای حاصل ضرب  $\mu\tau$  از مرتبه  $(\text{cm}^2/\text{V}) \times 10^{-3}$  می‌باشند. که دلیل اصلی چنین تراپرد بزرگی را می‌توان به کوچک بودن جرم مؤثر حاملان بار نسبت داد. در حالی است که این حاصل ضرب برای آشکارسازهای تجاری از قبیل  $\text{CdTe}$  و  $\text{CZT}$  برای الکترون از مرتبه  $10^{-2}$ - $10^{-3}$  و برای حفره از مرتبه  $10^{-4}$ - $10^{-5}$  گزارش شده است. بنابراین به دلیل یکسان بودن حاصل ضرب  $\mu\tau$  در کریستال  $\text{CsSnBr}_3$ ، پالس نهایی حاصل از جمع‌آوری هر دو حامل بار خواهد بود. در نتیجه ساختار  $\text{CsSnBr}_3$  پتانسیل بهتری برای استفاده در آشکارسازهای پرتو ایکس و گاما از خود می‌تواند نشان دهد.

**کلیدواژه‌ها:** پروسکایت، ثابت‌های الاستیک، جرم مؤثر، پتانسیل تغییر شکل، حاصل ضرب تحرک‌پذیری-زمان واهلش

## A study of electronic and transport properties of $\text{CsSnBr}_3$ : A first principle study

S. Nazari\*, Y. Taghipour Azar, Z. Riazi, N. Babaei

Physics and Accelerators Research School, Nuclear Science and Technology Research Institute, AEOI, P.O.Box:11365-8486, Tehran-Iran

Research Article

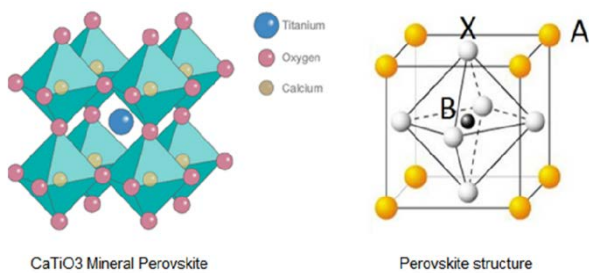
Received 30.1.2022, Accepted 8.6.2022

### Abstract

$\text{CsSnBr}_3$  nanocrystals are better than other lead-free perovskites because of their ease and low-cost synthesis, long-term function, and good stability. It is a suitable selection for use in tandem photodetectors. In this study, using the density functional theory, in the first stage, the elastic and electronic properties were calculated. Next, using the calculated quantities, the product of mobility-lifetime ( $\mu\tau$ ) of the charge carriers of  $\text{CsSnBr}_3$  was calculated. According to the results obtained, both of the electron and the hole have the lifetime-mobility product of an order  $10^{-3}$  ( $\text{V} / \text{cm}^2$ ). The main reason for this can be attributed to the small effective mass of the charge carriers. However, this product has been reported for commercial detectors such as  $\text{CdTe}$  and  $\text{CZT}$  for electrons was of an order  $10^{-3}$ - $10^{-2}$  and for holes in of an order  $10^{-4}$ - $10^{-5}$ . Therefore, due to the same of the product  $\mu\tau$  in the  $\text{CsSnBr}_3$  crystal, the final pulse will be the sum of both charge carriers. As a result, the  $\text{CsSnBr}_3$  structure can show better potential for use in X-ray and gamma detectors.

**Keywords:** Perovskite, Elastic constant, Effective mass, Deformation potential, Mobility-lifetime product





شکل ۱. ساختار کلی ترکیبات پروسکایت و ساختار  $\text{CaTiO}_3$ .

## ۱. مقدمه

نیاز روزافزون به توسعه آشکارساز پرتوهای گاما و ایکس با طیف وسیعی از کاربرد در تصویربرداری هسته‌ای، پایش رادیواکتیوته محیط، صنایع مرتبط با هوافضا و... توجه طیف وسیعی از محققین علوم مواد و مهندسی را به این زمینه معطوف داشته است. مواد نیم‌رسانا با قابلیت تفکیک طیفی بسیار دقیق و حساسیت بالای آن‌ها یکی از بهترین گزینه‌ها در ساخت آشکارسازهای ایکس و گاما به شمار می‌آیند. بر خلاف نیم‌رساناهای متداول سیلیکون و ژرمانیم، نیم‌رساناهای ترکیبی دارای گاف نسبتاً بزرگ نواری هستند که نویز طیفی ناشی از جابه‌جایی‌های گرمایی حامل‌ها را کاهش داده و در دمای اتاق قابل استفاده هستند.

اولین ساختار پروسکایت در سال ۱۸۳۹ در کوه‌های اورال روسیه توسط گوستاو روز<sup>۱</sup> کشف گردید و  $\text{CaTiO}_3$  ساختار کریستالی این ساختار به احترام کانی‌شناس معدنی، لو پروسکی<sup>۲</sup> به نام پروسکایت نام‌گذاری گردید. امروزه هر ساختاری با شکل کریستالی کلی  $\text{ABX}_3$  با فرض ساختار مکعبی شامل کاتیون A در رئوس مکعب، کاتیون B در مرکز مکعب که با ۶ آنیون X که در مرکز وجوه مکعب با تشکیل شبکه‌ی هشت وجهی قرار دارند، را ساختار پروسکایت گویند (شکل ۱) [۱].

در سال ۱۹۲۶، گلدشمیت اظهار داشت که یک جامد در صورتی می‌تواند ساختار پروسکایت اتخاذ کند که نسبت شعاع‌های اتمی آن رابطه‌ی (۱) را برآورده کند:

$$R_A + R_B = t \times \sqrt{2} (R_B + R_X) \quad (1)$$

پروسکایت‌ها غالباً در محدوده‌ی تحمل  $0.81 \leq t \leq 1.0$  شکل می‌گیرند. مقادیر تحمل (t) بالاتر از ۱ ساختار هگزگونال و مقادیر کم‌تر از ۰٫۸ ساختار نانو- پروسکایت را ایجاد می‌کند [۲].

امکان به‌کارگیری ترکیبات پروسکایت در ادوات اپتوالکترونیکی طی چند سال اخیر توجه فراوانی را بخود معطوف داشته است. هم‌چنین نظر به خواص الکترونی و اپتیکی منحصر به فرد، ساختارهای پروسکایت کاندیدای مناسبی جهت استفاده در آشکارسازهای نیم‌رسانا به شمار می‌آیند [۳].

با توجه به تنوع نسبتاً بالای ساختارهای پروسکایت استفاده از طراحی محاسباتی جهت تعیین ساختارهای مناسب سهم به‌سزایی در کاستن هزینه‌های ساخت و بهینه‌سازی آشکارسازهای مبتنی بر پروسکایت دارد. این ساختارها اصولاً به صورت پروسکایت‌های آلی- معدنی و پروسکایت‌های معدنی طبقه‌بندی می‌شوند. ساختارهای شامل مولکول‌های آلی دارای دو ویژگی اصلی بازدهی بالا و تولید ارزان و آسان می‌باشند، اما پایداری بسیار پایینی در برابر رطوبت و دمای بالا از خود نشان می‌دهند. برای حل این مشکل چند ایده توسط گروه‌های پژوهشی مختلف عنوان گردیده است که یکی از آن‌ها استفاده از ساختارهای پروسکایت معدنی است. ساختارهای معدنی مبتنی بر سرب علی‌رغم خواص ساختاری و الکترونی خوبی که از خود نشان می‌دهند به دلیل سمی بودن سرب دارای یک نقطه ضعف اساسی می‌باشند. نانو کریستال  $\text{CsSnBr}_3$  نسبت به سایر پروسکایت‌های فاقد سرب به دلیل سنتز راحت و ارزان، عملکرد طولانی‌مدت و پایداری بهتر یک گزینه مناسب برای استفاده در آشکارسازهای نوری تاندم<sup>۳</sup> می‌باشد [۴].

همان‌طور که می‌دانیم مواد جامد دارای ساختار نوار انرژی مخصوص بخود هستند و تفاوت در ساختار نواری آن‌ها باعث تفاوت در خواص الکتریکی‌شان می‌شود. خواص مورد توجه در کاربردهای اپتوالکترونی نظیر عمر حالت برانگیخته، مکانیزم بازترکیب، تحرک و تراکم حامل‌های بار ذاتی و بسیاری خواص دیگر با مطالعه ساختار نواری و چگالی حالات مواد را می‌توان بررسی نمود. از این‌رو مناسب است که بحث در مورد خواص الکترونی ساختار  $\text{CsSnBr}_3$  را از همین منظر آغاز کنیم.

در این پژوهش با استفاده نظریه تابعی چگالی (DFT)<sup>۴</sup> خواص الاستیکی و الکترونی ساختار پروسکایت  $\text{CsSnBr}_3$  محاسبه نموده و در نهایت با استفاده از پارامترهای استخراج شده و تئوری پتانسیل تغییر شکل<sup>۵</sup> حاصل ضرب ( $\mu\text{T}$ ) که یک کمیت کلیدی برای توسعه آشکارسازهای پرتویی می‌باشد، محاسبه گردید.

3. Tandem

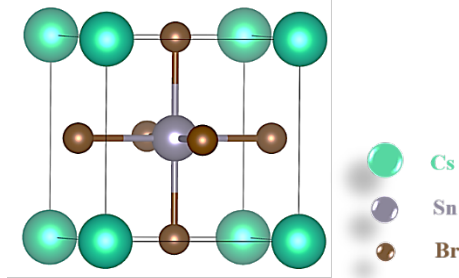
4. Density Functional Theory

5. Deformation Potential

1. Gustav Rose

2. Lev Alekseyevich Von Perovski



شکل ۲. ساختار کریستالی CsSnBr<sub>3</sub>.

ماتریس کرنش در حالت کلی با استفاده از رابطه (۴) مشخص می‌شود:

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 1 + \delta_{00} & \delta_{00} & \delta_{00} \\ \delta_{00} & 1 + \delta_{00} & \delta_{00} \\ \delta_{00} & \delta_{00} & 1 + \delta_{00} \end{pmatrix} \quad (4)$$

حال با توجه به این‌که کرنش اعمال شده در چه جهتی صورت بگیرد ماتریس‌های کرنش مختلفی خواهیم داشت. با توجه به متقارن بودن تانسور کرنش  $\delta_{ij} = \delta_{ji}$  و با استفاده از نمادگذاری وویگت<sup>۱</sup> (یعنی رابطه (۵)) و کاهش تعداد اندیس‌ها یک ماتریس ۶×۶ برای ثابت‌های الاستیک، رابطه (۶) را خواهیم داشت.

$$\begin{cases} xx \rightarrow 1, yy \rightarrow 2, zz \rightarrow 3 \\ zy \rightarrow 4, xz \rightarrow 5, xy \rightarrow 6 \end{cases} \quad (5)$$

چنان‌چه ساختار مکعبی باشد وجود تقارن‌های سه گانه و دو گانه در شبکه‌های مکعبی منجر به حذف یا یکسان شدن برخی ثابت‌های الاستیک می‌شود. با در نظر گرفتن این موارد برای ساختار مکعب تنها سه ثابت الاستیک مستقل می‌ماند و بنابراین ماتریس C به شکل رابطه (۶) استخراج می‌شود.

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \quad (6)$$

## ۲. روش محاسبات

محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و حل خودسازگار معادلات کوهن-شم، با به‌کارگیری بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو انجام گرفته است. در انجام محاسبات از تقریب گرادیان تعمیم یافته و شبه پتانسیل‌های نسبیتی از نوع اسکالر استفاده شده است. در بسط توابع موج و چگالی الکترونی، انرژی‌های قطع به ترتیب ۳۰ و ۲۴۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است. در بهینه‌سازی‌های ساختاری برای انتگرال‌گیری در منطقه اول بریلون از مش ۸×۸×۸ استفاده شده است و واهلش تمام اتم‌ها، تا محدوده ۰/۰۰۱ Å/Ry برای نیروهای باقی‌مانده در نظر گرفته شده است.

پروسکایت CsSnBr<sub>3</sub> در دمای اتاق دارای شبکه‌ی کریستالی مکعبی با گروه فضایی Pm-3m (با شماره ۲۲۱) می‌باشد. اتم Cs در جایگاه تقارنی a با مختصات (۰, ۰, ۰) و اتم Sn در جایگاه b با مختصات (۰/۵, ۰/۵, ۰/۵) و با گروه نقطه‌ای m-3m قرار می‌گیرند در حالی‌که سه اتم برم در جایگاه تقارنی c با مختصات (۰/۵, ۰/۵, ۰), (۰/۵, ۰, ۰/۵) و (۰, ۰/۵, ۰/۵) و با گروه نقطه‌ای ۴/mm.m قرار می‌گیرند. نمایه‌ای از ساختار کریستالی پروسکایت CsSnBr<sub>3</sub> در شکل ۲ نشان داده شده است.

## ۳. نتایج

زمانی که به یک ماده کرنش از نوع الاستیک وارد می‌شود با توجه به این‌که انرژی آزاد سیستم یک کمیت اسکالر است، می‌توان نشان داد که بین کرنش اعمال شده و تنش ایجاد شده رابطه مستقیم به صورت رابطه (۲) برقرار می‌شود که این موضوع در مطابقت با قانون هوک است.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \delta_{kl} \quad (2)$$

در رابطه بالا  $\sigma_{ij}$  مؤلفه i ام تنش در جهت j،  $\delta_{kl}$  کرنش متناظر و تانسور مرتبه ۴  $C_{ijkl}$  وابسته به خواص الاستیکی ماده می‌باشد و به عنوان ثابت‌های الاستیک ماده تعریف می‌شوند. با توجه به این‌که کرنش از نوع الاستیک است پس می‌توان انرژی کل سیستم را نسبت به کرنش کوچک  $\delta$  بسط تیلور داد. براین اساس اگر فرض کنیم بردار شبکه اولیه سیستم R و بعد از اعمال کرنش R باشد و ماتریس کرنش را با D نشان دهیم، در این صورت رابطه بین سه عنصر به شکل رابطه (۳) نوشته می‌شود:

$$R' = DR \quad (3)$$



در جدول ۱ B مدول حجمی<sup>۲</sup>، E مدول یانگ<sup>۳</sup> و G مدول برشی<sup>۴</sup> ساختار را نشان می‌دهد که با استفاده از روابط زیر به ثابت‌های الاستیک مرتبط می‌شوند:

$$B = \frac{1}{3}(c_{11} + 2c_{12}) \quad (9)$$

$$G = \frac{1}{5}(3c_{44} + c_{11} - c_{12}) \quad (10)$$

$$Y = \frac{9BG}{3B + G} \quad (11)$$

در گام بعد از محاسبات با استفاده از تئوری پتانسیل تغییرشکل که اولین بار در سال ۱۹۵۰ توسط باردین<sup>۵</sup> و شاکلی<sup>۶</sup> عنوان گردید [۸]، حاصل ضرب تحرک‌پذیری و زمان واهلش (μτ) محاسبه شد. بنابر بر نتایج به دست آمده برای مواد غیرقطبی<sup>۷</sup> تحرک‌پذیری الکترون و حفره‌ها از برهم‌کنش با موج‌های آکوستیک محاسبه می‌شود.

در حضور یک میدان الکتریکی تحرک‌پذیری (μ) یک بار الکتریکی به صورت سرعت رانش بار<sup>۸</sup> در واحد میدان الکتریکی به صورت رابطه (۱۲) تعریف می‌شود:

$$\mu = \frac{v}{E} \quad (12)$$

که این کمیت معمولاً برحسب  $cm^2/Vs$  بیان می‌شود. با توجه به رابطه نیرو با بردار موج k در داخل یک کریستال [۹] تغییر تکانه برای بار الکتریکی را می‌توان به صورت رابطه (۱۳) بیان کرد:

$$\hbar \frac{dk}{dt} = F = eE \Rightarrow \Delta p = eE\tau \quad (13)$$

در این رابطه τ زمان واهلش است. اگر بار الکتریکی دارای جرم مؤثر m\* باشد سرعت رانش و در نهایت تحرک‌پذیری بار با استفاده از رابطه (۱۴) محاسبه می‌شود:

$$v = \frac{e\tau E}{m^*} \Rightarrow \tau = \frac{e\mu}{m^*} \quad (14)$$

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \quad (7)$$

در نهایت برای محاسبه ثابت‌های الاستیک باقی‌مانده باید از تابع انرژی کل کمک گرفت. در واقع با توجه به این‌که کرنش اعمال شده به صورت محوری باشد یا برشی می‌توان انرژی کل را تا مرتبه دوم بسط تیلور داد. با توجه به این‌که نوارهای انرژی مورد نظر ما نوارهای ظرفیت و رسانش هستند پس این بسط حول دو نقطه اکسترمم صورت می‌گیرد. اما به دلیل این‌که حول نقاط اکسترمم تکانه صفر است پس بسط تیلور انرژی برحسب کرنش تا مرتبه دوم به صورت رابطه (۷) خواهد بود. در گام بعد برای محاسبه ثابت‌های الاستیک مورد نظر کافی است اختلاف انرژی قبل و بعد از اعمال کرنش را محاسبه کنیم. در این حالت با در نظر گرفتن در راستاهای مختلف ثابت‌های الاستیک مختلف به دست می‌آید و با استفاده از این ثابت‌ها سایر خواص الاستیکی مربوط به ساختار محاسبه می‌شود [۵].

$$E(V, \delta) = E(V) + V \left( \frac{1}{V} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 C_{ij} \delta_i \delta_j + (\delta^T) \right) \quad (8)$$

آن‌چه که گفته شد رویکرد استفاده شده برای محاسبه خواص الاستیکی یک ساختار دلخواه در کد thermo\_pw است [۶].

در گام اول محاسبات بعد از واهلش ثابت‌های ساختار سیستم از این کد برای محاسبه خواص الاستیکی سیستم CsSnBr<sub>3</sub> استفاده کردیم. نتایج محاسبات در جدول ۱ درج گردیده است که با نتایج تئوری گزارش شده توسط خلیل<sup>۱</sup> و همکارانش توافق خوبی دارد [۷].

جدول ۱. ثابت‌های الاستیک محاسبه شده برای ساختار CsSnBr<sub>3</sub>

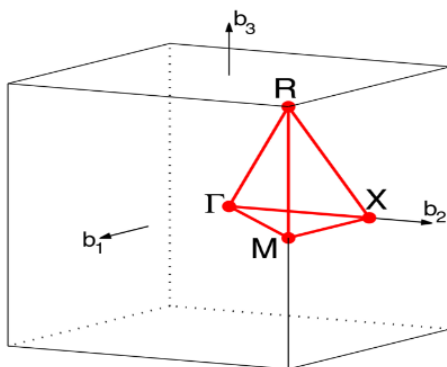
C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	B	E	G	(GPa)
۴۳٫۷۹	۷٫۶۴	۵٫۰۵	۱۹٫۳۵	۲۲٫۳	۸٫۶	کار حاضر
۴۵٫۳۶	۷٫۴۲	۵٫۵۹	۲۰٫۰۷	۲۴٫۳۲	۹٫۳۷	کار دیگران [۷]

2. Bulk Modulus
3. Young Modulus
4. Shear Modulus
5. Bardeen
6. Shockley
7. Non-Polar
8. Charge Drift Velocity



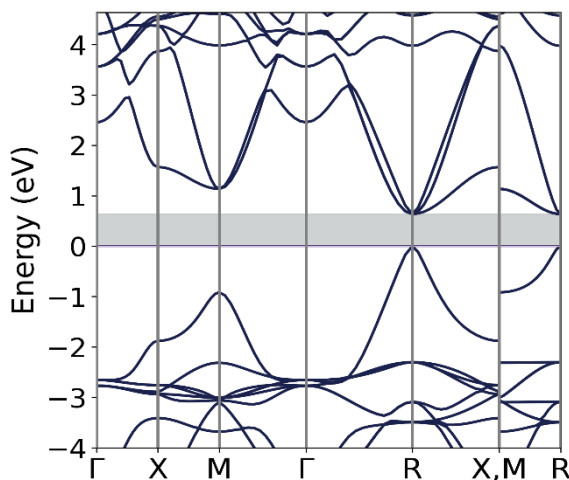
محاسبات مربوط به ساختارهای نواری و بسیاری از خواص فیزیکی دیگر در فضای معکوس بر روی منطقه اول بریلوئن انجام می‌پذیرد. اما حضور تقارن‌های شبکه‌ای منجر به تکراری بودن تعدادی از این محاسبات می‌شود. به منظور کاهش هزینه محاسبات با توجه به تقارن‌های موجود در شبکه کریستالی نقاط هم‌ارز از این محاسبات حذف می‌شوند و انتگرال‌گیری بر روی یک منطقه کوچک‌تر که به عنوان منطقه اول بریلوئن کاهش نیافته شناخته شده است، انجام می‌پذیرد. این منطقه برای ساختار مکعبی ساده در شکل ۳ نشان داده شده است که این ناحیه ۱/۴۸ منطقه اول بریلوئن می‌باشد. در این شکل مرجع یا به عبارتی صفر انرژی بر روی بالاترین حالت اشغال شده قرار داده شده است.

همان‌طور که از شکل ۴ مشاهده می‌شود، ساختار نواری کریستال CsSnBr<sub>3</sub> دارای گاف انرژی مستقیم در نقطه تقارنی R=(۰,۰,۵) می‌باشد. نتایج به‌دست آمده با نتایج تئوری گزارش شده توسط گوانگ بیو<sup>۱</sup> در تطابق کامل است [۱۰].



CUB path:  $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$ -R-X|M-R

شکل ۳. منطقه اول بریلوئن شبکه مکعبی ساده.



شکل ۴. ساختار نواری برای CsSnBr<sub>3</sub>.

شاکلی و باردین با استفاده از روش جرم مؤثر و اعمال کرنش بر شبکه کریستالی تحرک‌پذیری و زمان واهلش حاملان بار را به صورت تئوری استخراج نمودند. زمانی که به سیستم کرنش اعمال می‌شود اگر جابه‌جای لبه‌ی نواری انرژی در نواری ظرفیت را با  $E_{IV}\Delta$  و در نواری رسانش را با  $E_{IC}\Delta$  نمایش دهیم. در این صورت تغییر پتانسیل را می‌توان به شکل رابطه (۱۵) نوشت.

$$\delta U = E_i \Delta(r) \quad (15)$$

در رابطه بالا  $E_i$  به عنوان پتانسیل تغییر شکل تعریف می‌شود. شاکلی و باردین در مقاله خود این جمله را به عنوان یک اختلاف برای ساختار کریستالی در نظر گرفتند. در نهایت با محاسبه احتمال گذار بین حالت مختل نشده و حالت مختل شده زمان واهلش و تحرک‌پذیری حاملان بار به ترتیب با استفاده از روابط (۱۶) و (۱۷) به دست آورده می‌شوند.

$$\mu = \frac{2(2\pi)^{3/2} e \hbar^2 c_q}{3 E_i (k_B T)^{3/2} m^{*5/2}} \quad (16)$$

$$\tau = \frac{e\mu}{m^*} \quad (17)$$

در روابط بالا  $m^*$  جرم مؤثر حاملان بار، و  $C_q$  ثابت الاستیک ساختار است که با استفاده از رابطه (۷) به سرعت طولی (V<sub>l</sub>) موج و چگالی جرمی ساختار مربوط می‌شود.

$$C_q = \rho v_l^2 \quad (18)$$

سرعت طولی را می‌توان با استفاده از مدول یانگ و مدول برشی با استفاده از رابطه (۱۹) به دست آورد.

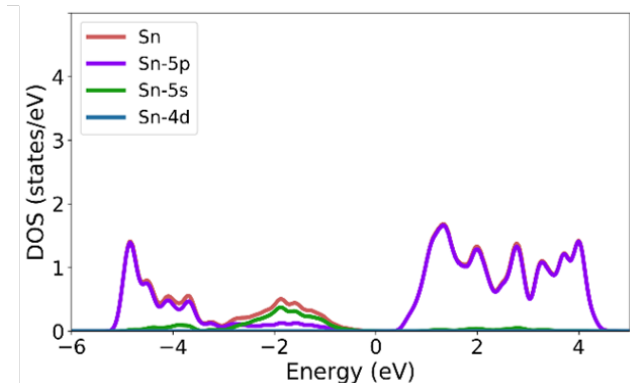
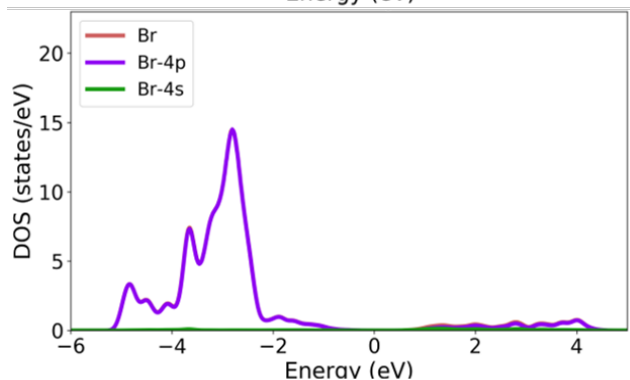
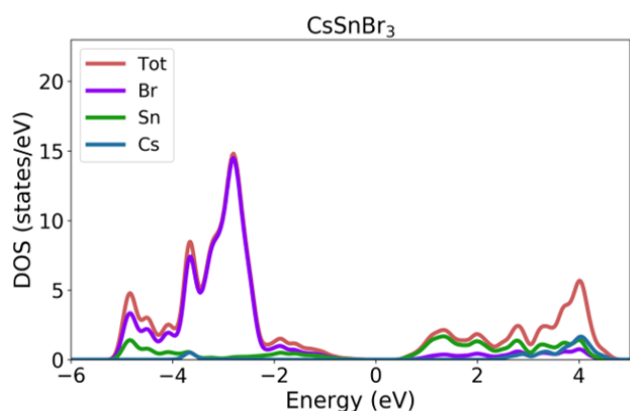
$$v_l = \sqrt{(B + \frac{3}{4}G) / \rho} \quad (19)$$

ساختار نواری انرژی بیانگر بازه‌ی انرژی برای نواری مجاز و غیرمجاز می‌باشد. فاصله این دو دسته از نواری ساختارهای نیمه‌رسانا و نارسانا به عنوان گاف انرژی تعریف می‌شود. جرم مؤثر حاملان بار یک کمیت مهم است که می‌توان از دل این محاسبات استخراج کرد. بر این اساس در گام اول محاسبات ساختار نواری CsSnBr<sub>3</sub> را محاسبه نمودیم.



جدول ۲. گاف انرژی و جرم مؤثر حاملان بار برای ساختار

$m_e^*$	$m_h^*$	$E_g$	
۰٫۰۱	۰٫۰۰۶	۰٫۶۳	کار حاضر
-	۰٫۰۸۲	۰٫۳۸	کار دیگران [۱۱]



شکل ۵. چگالی حالت‌های تصویر شده اتمی (الف)، اوربیتال‌های اتمی Br (ب)، اوربیتال‌های اتمی Sn (ج).

جدول ۳. پتانسیل تغییر شکل محاسبه شده و حاصل ضرب (μT) برای ساختار CsSnBr<sub>3</sub>

$(\mu T)_e$	$(\mu T)_h$	$E_1^{CBM}$	$E_1^{VBM}$	
(cm <sup>2</sup> /s)	(cm <sup>2</sup> /s)	(eV)	(eV)	
$3,2 \times 10^{-2}$	$4,4 \times 10^{-2}$	۱۵٫۴۴	۸٫۲۹	کار حاضر

به صورتی که شکل ۴ نشان می‌دهد، در همسایگی خیلی نزدیک از نقطه R می‌توان نوار انرژی را با یک سهمی تقریب زد و براین اساس جرم مؤثر حاملان بار محاسبه نمود.

$$\varepsilon(k_0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow m^* = \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k^2}\right)^{-1} \quad (20)$$

نتایج این محاسبات در جدول ۲ نمایش داده شده است. در تطابق با نتایج درج شده در جدول ۲، با توجه به این که انحنا نوار انرژی در نوار رسانش کمتر است بنابراین انتظار می‌رود که جرم مؤثر حامل بار یعنی الکترون در این ناحیه کم‌تر باشد.

یک عامل اساسی دیگر در تعیین خواص الکترونی جامدات، توزیع انرژی الکترون‌های نوار رسانش و ظرفیت است که می‌توان نتایج حاصل از اجرای محاسبات را به صورت منحنی چگالی حالت بر حسب انرژی ارائه کرد. سطح زیر منحنی تا لبه نوار ظرفیت، بیانگر تعداد حالت‌های مجاز برای حضور الکترون‌ها است. یک نتیجه مهم از این دسته از محاسبات مشخص شدن سهم اوربیتال‌های اتمی مختلف نوارهای ظرفیت و رسانش است. به صورت مشخص شده در شکل ۵ اوربیتال‌های اتمی سزیم در نوار ظرفیت و رسانش سهمی ندارند و به عبارتی سهم حاملان بار در اتم سزیم در این نوارها قابل صرف نظر است. سهم اصلی اوربیتال‌های اتمی در نوار ظرفیت ناشی از اوربیتال‌های p اتم‌های Br و به صورت جزئی از اوربیتال p اتم Sn اما این روند در نوار رسانش برعکس می‌شود یعنی سهم غالب از اوربیتال p اتم Sn و به صورت ناچیز از اوربیتال‌های اتمی Br ناشی می‌شود.

کمیت آخری که باید برای محاسبه حاصل ضرب (μT) محاسبه شود، پتانسیل تغییر شکل (E<sub>1</sub>) است. برای محاسبه این کمیت نیاز است جابه‌جایی لبه‌های نوار ظرفیت و نوار رسانش بعد از اعمال کرنش به ساختار مشخص شود. در این صورت پتانسیل تغییر شکل با استفاده از رابطه (۲۱) محاسبه می‌شود.

$$E_1 = \frac{\Delta U}{\delta} \quad (21)$$

در رابطه بالا ΔU تغییر انرژی در لبه‌های نوار رسانش و ظرفیت است.





$\text{CsSnBr}_3$  اضافه کرد. به عنوان مثال گوپتا<sup>۳</sup> و همکارانش در سال ۲۰۱۶ نشان دادند که اضافه شدن  $\text{SnF}_2$  مشکل اکسید شدن این ساختار را تا حد خوبی برطرف می‌کند [۱۴].

#### ۴. نتیجه‌گیری

نانو کریستال  $\text{CsSnBr}_3$  نسبت به سایر پروسکایت‌های فاقد سرب به دلیل سنتز راحت و ارزان، عملکرد طولانی مدت و پایداری بهتری که خوبی که از خود نشان می‌دهد یک گزینه مناسب برای استفاده در آشکارسازهای نوری جفت‌شده است. در این پژوهش با استفاده نظریه تابعی چگالی (DFT) خواص الاستیکی و الکترونی این پروسکایت محاسبه شده است. در نهایت با استفاده از نتایج به دست آمده و با استفاده از تئوری پتانسیل تغییر شکل کمیت ( $\mu\text{T}$ ) که یک کمیت مهم در بررسی تراپرد حاملان بار در آشکارسازهای نیمه‌هادی است، محاسبه شده است. در این بررسی این کمیت برای هر دو الکترون و حفره از مرتبه  $10^{-3}$  تخمین زده شده است. که این میزان از تراپرد را می‌توان به کوچک بودن جرم مؤثر حاملان بار نسبت داد.

#### مراجع

1. F.S. Galasso, *Structure, Properties and Preparation of Perovskite-Type Compounds*, (Pergamon, New York, (1969).
2. R.J.D. Tilley, *Perovskites structure-property relationships*, (John Wiley & Sons, 2016).
3. Y.T. Feng, R. Zheng, *Recent advances in radiation detection technologies enabled by metal-halide perovskites*, *Materials Advances* (2021).
4. L. Bingham, et al, *All-Inorganic Perovskite  $\text{CsSnBr}_3$  as a Thermally Stable, Free-Carrier Semiconductor*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57** (40), 13154 (2018).
5. P.W.O. Nyawere, N.W. Makau, G.O. Amolo, *First-principles calculations of the elastic constants of the cubic, orthorhombic and hexagonal phases of  $\text{BaF}_2$* , *Physica B: Condens. Matter*, **434**, 122 (2014).
6. [https://dalcorso.github.io/thermo\\_pw](https://dalcorso.github.io/thermo_pw).
7. M.I. Kholil, et al, *Influence of molybdenum and technetium doping on visible light absorption, optical and electronic properties of lead-free perovskite  $\text{CsSnBr}_3$  for optoelectronic applications*, *RSC Adv*, **11**(4), 2405 (2021).
8. J. Bardeen, W. Shockley, *Deformation potentials and mobilities in non-polar crystal*, *s, Phys. Rev.*, **80**(1), 72 (1950).

به گونه‌ای که قبلاً ذکر شد در توسعه آشکارسازهای پرتویی این حاصل‌ضرب یک کمیت کلیدی محسوب می‌شود. در واقع این کمیت برای محاسبه بازده جمع شدن بار (CCE)<sup>۱</sup> در الکتروود آشکارسازها که با استفاده از رابطه (۲۲) محاسبه می‌شود، استفاده می‌شود.

$$CCE = \frac{Q}{Q_0} = \frac{\lambda_e}{L} [1 - \exp(-\frac{L - x_0}{\lambda_e})] + \frac{\lambda_h}{L} [1 - \exp(-\frac{x_0}{\lambda_h})] \quad (22)$$

در رابطه (۲۲)  $L$  و  $x$  به ترتیب ضخامت آشکارساز و مکان برهم‌کنش پرتو فرودی می‌باشند و هم‌چنین  $\lambda_e = E\mu_e\tau_e$  و  $\lambda_h = E\mu_h\tau_h$  به ترتیب میانگین طول رانش<sup>۲</sup> برای الکترون و حفره را نمایش می‌دهند. به‌گونه‌ای که می‌توان مشاهده کرد CCE نه تنها به  $\lambda_e$  و  $\lambda_h$  وابسته است بلکه به مکان برهم‌کنش پرتو فرودی نیز وابسته است.

در اصل کوچک بودن حاصل‌ضرب ( $\mu\text{T}$ ) منجر به کوچک بودن کمیت  $\lambda$  و بنابراین کوچک شدن نسبت  $\lambda/L$  می‌شود. کوچک بودن این نسبت خود باعث محدود شدن ضخامت و گسترده انرژی‌های مجاز برای آشکارساز می‌شود [۱۲].

براساس نتایج جدول ۳، برای ساختار  $\text{CsSnBr}_3$  حاصل‌ضرب ( $\mu\text{T}$ ) برای الکترون و حفره تقریباً یکسان و از مرتبه  $10^{-3}$  است که مقداری نسبتاً بزرگ است. این مقدار در مقایسه با آشکارسازهای تجاری  $\text{CdTe}$  و  $\text{CZT}$  که این حاصل‌ضرب برای الکترون از مرتبه  $10^{-2}$  تا  $10^{-3}$  و برای حفره از مرتبه  $10^{-4}$  تا  $10^{-5}$  به صورت تجربی گزارش شده، مناسب است [۱۳]. بنابراین نتایج گزارش شده حاصل‌ضرب ( $\mu\text{T}$ ) برای الکترون و حفره برای این ساختارهای تجاری یکسان نیست اما بنابر نتایج به دست آمده در این مطالعه برای ساختار  $\text{CsSnBr}_3$  این حال‌ضرب برای الکترون و حفره یکسان است که منجر به استفاده از هر دو حامل بار در تشکیل سیگنال نهایی آشکارساز خواهد شد. بنابراین می‌توان گفت که ساختار  $\text{CsSnBr}_3$ ، پتانسیل استفاده در آشکارسازهای پرتو ایکس و گاما را دارد. تنها مشکل این ساختار برای چنین کاربردی، اکسید شدن این ساختار در معرض رطوبت است. برای حل این مشکل می‌توان از یک لایه محافظ استفاده یا ترکیبات دیگری در هنگام سنتز

3. Gupta

Journal of Nuclear Science and Technology

Vol. 44 (4), Serial Number 105, 2023, P 1-8

1. Charge Collection Efficiency

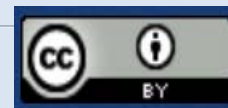
2. Mean Drift Length



9. E. Kaxiras, *Atomic and electronic structure of solids*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2003).
10. X. Guangbiao, et al, *Structural and Optoelectronic Properties of Two-Dimensional Ruddlesden – Popper Hybrid Perovskite  $\text{CsSnBr}_3$* , *Nanomaterials*, **11(8)**, 2119 (2021).
11. L.Y. Huang, W.R. Lambrecht, *Electronic band structure, phonons, and exciton binding energies of halide perovskites  $\text{CsSnCl}_3$ ,  $\text{CsSnBr}_3$ , and  $\text{CsSnI}_3$* , *Phys. Rev. B* **88(16)**, 165203 (2013).
12. D.S. Sordo, et al, *Progress in the development of CdTe and CdZnTe semiconductor radiation detectors for astrophysical and medical applications*, *Sensors*, **9(5)**, 3491-3526 (2009).
13. T.E. Schlesinger, et al, *Cadmium zinc telluride and its use as a nuclear radiation detector material*, *Materials Science and Engineering: R: Reports*, **32(4-5)**, 103-189 (2001).
14. S. Gupta, et al,  *$\text{CsSnBr}_3$ , a lead-free halide perovskite for long-term solar cell application: insights on SnF2 addition*, *ACS Energy Letters*, **1(5)**, 1028-1033 (2016).

**COPYRIGHTS**

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



استناد به این مقاله

صفیه نظری، یاور تقی پور آذر، زعفر ریاضی، نادیا بابایی (۱۴۰۲)، بررسی خواص الکترونی و تراپردی  $\text{CsSnBr}_3$ : مطالعه اصول اولیه، ۱۰۵، ۸-۱

DOI: [10.24200/nst.2022.1044.1704](https://doi.org/10.24200/nst.2022.1044.1704)Url: [https://jonsat.nstri.ir/article\\_1423.html](https://jonsat.nstri.ir/article_1423.html)