

## AB INITIO STUDY OF OPTICAL AND BULK PROPERTIES OF CESIUM LEAD HALIDE PEROVSKITE SOLID SOLUTIONS

*V. A. Saleev*<sup>1</sup>, *A. V. Shipilova*

Samara National Research University, Samara, Russia

The first-principles calculations of band gaps and bulk moduli of cesium lead halide perovskite solid solutions,  $\text{CsPb}(\text{I}_{1-x}\text{Cl}_x)_3$  and  $\text{CsPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ , are performed at the level of general gradient approximation of the density functional theory. We use supercell approach for computational modeling of disordered systems, which gives a description of the properties of the structure based on the average over a set of multiple configurations, namely distributions of different species over a given set of atomic positions. The calculations were performed with the CRYSTAL14 program package. The dependence of the band gap and bulk modulus on the content  $x$  is investigated over the whole range  $0 \leq x \leq 1$ .

В работе выполнены первопринципные расчеты ширины запрещенных зон и модулей упругости свинцово-цезиевых галогенных перовскитов  $\text{CsPb}(\text{I}_{1-x}\text{Cl}_x)_3$  и  $\text{CsPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$  в приближении обобщенного градиента теории функционала плотности. Мы используем метод суперячеек для компьютерного моделирования неупорядоченных систем, который позволяет описать свойства структуры, основываясь на усреднении по набору различных конфигураций, а именно распределений различных сортов атомов по данному набору атомных позиций. Вычисления были выполнены в программном пакете CRYSTAL14. Исследована зависимость ширины запрещенной зоны и модуля упругости от доли  $x$  во всем диапазоне  $0 \leq x \leq 1$ .

PACS: 71.15.Mb; 71.20.-b; 84.60.Jt

Received on June 23, 2019.

---

<sup>1</sup>E-mail: saleev@samsu.ru