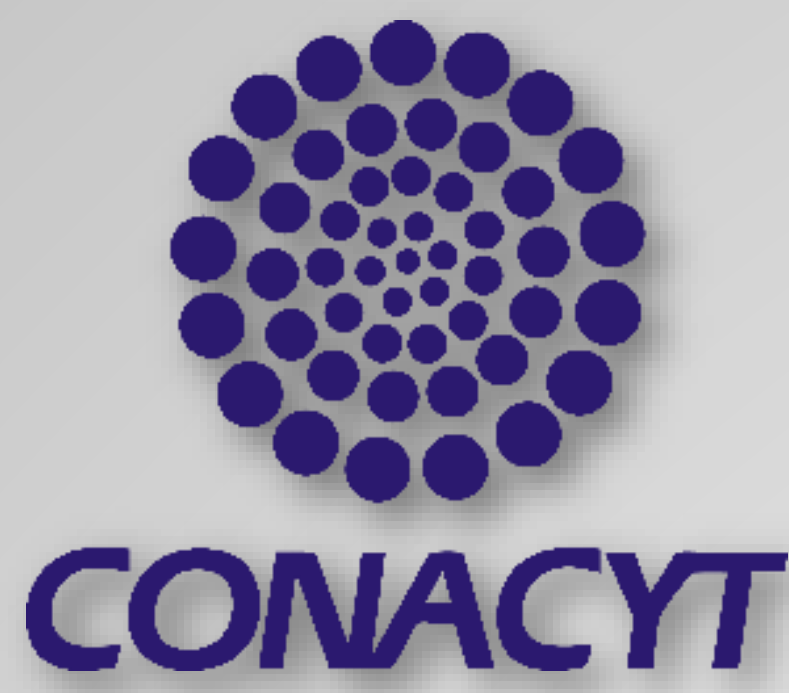




Perovskitas Ruddlesden-Popper (Un estudio DFT)



D. A. Juárez-Rosales , R. M. Torres-Rojas , D. A. Contreras-Solorio , A. Enciso.
Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Consejo
Nacional de Ciencia y Tecnología, Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la
Luz y la Materia.



Resumen:

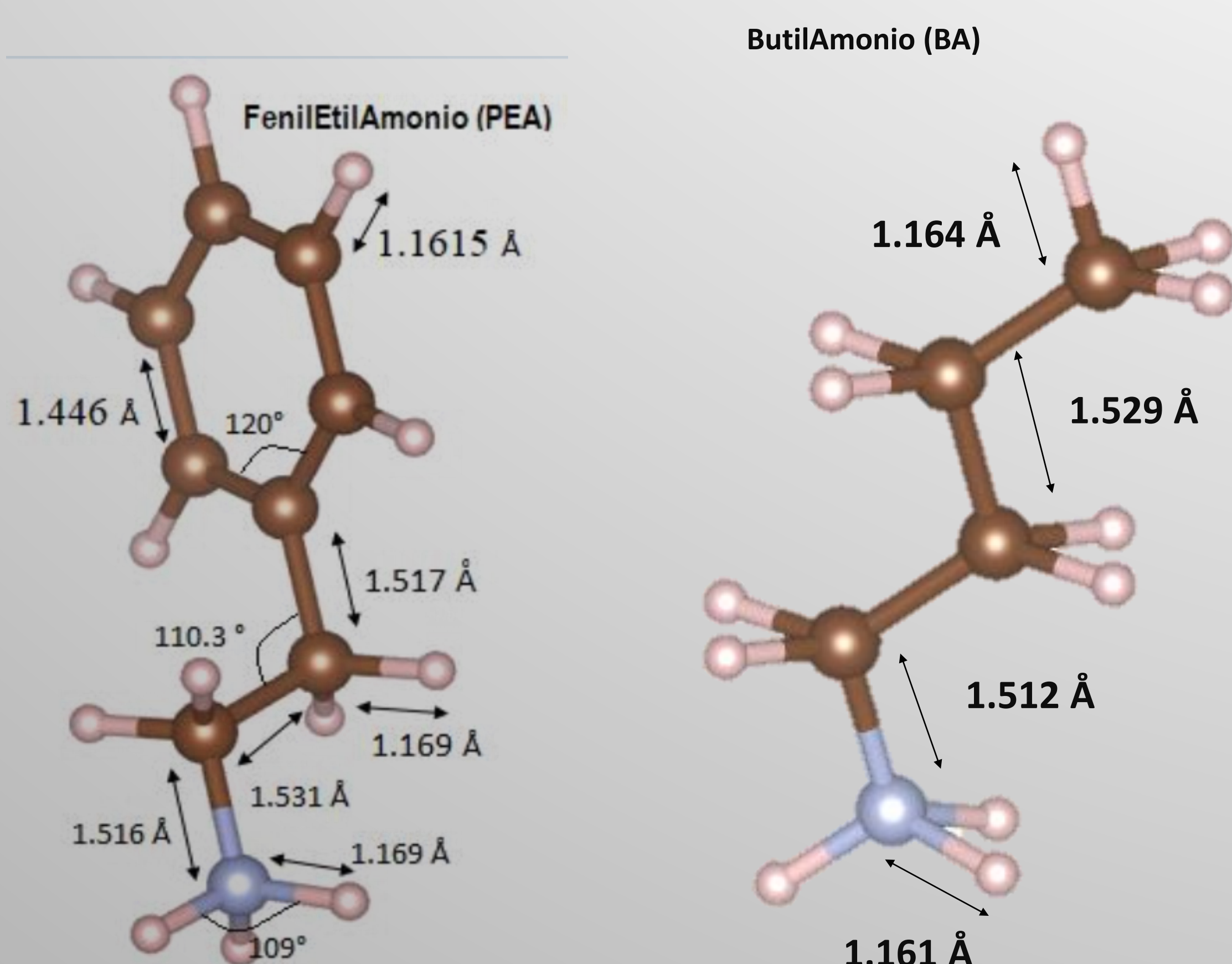
Las perovskitas de haluros metálicos son de gran interés, principalmente en celdas solares, pues son hechas de materiales económicos. Han alcanzado eficiencias hasta del 26% en muy poco tiempo. Pero tienen el obstáculo de estabilidad pobre con respecto a humedad, calor, luz y oxígeno. Recientemente se han caracterizado Perovskitas bidimensionales denominadas Ruddlesden Popper (RPP), las cuales han mostrado una mayor estabilidad y un amplio rango muy prometedor de aplicaciones ópticas y electrónicas. En este trabajo estudiamos las posiciones atómicas de las moléculas orgánicas Feniletilamonio (PEA) y Butilamonio (BA), al igual que las RPP: (PEA) 2PbI_4 y (BA) 2PbI_4 . Este estudio se realizó utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad, con ayuda del Código Wien2K.

Detalles computacionales (código y Método):

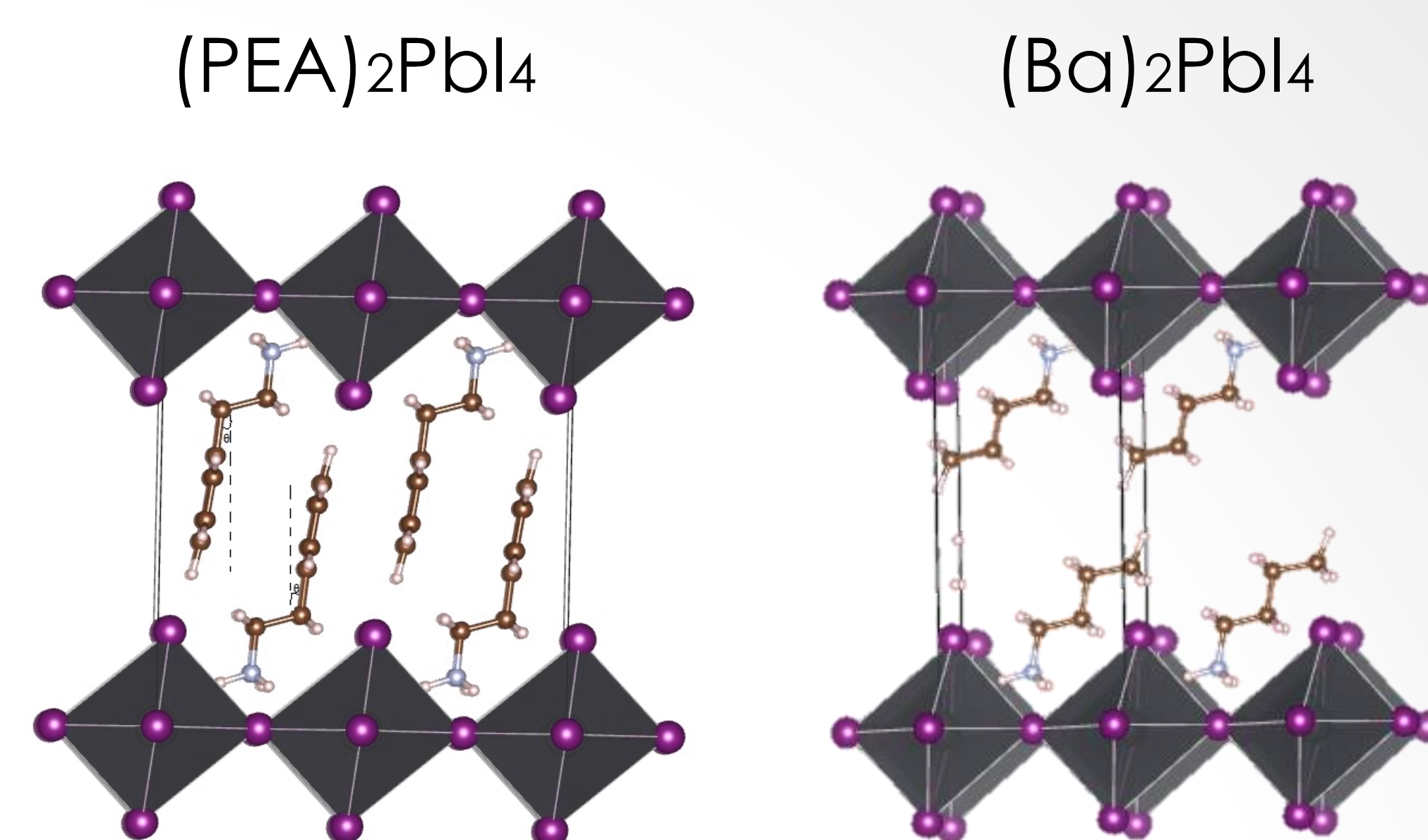
El código WIEN2k⁽¹⁾ es un software escrito en lenguaje Fortran, desarrollado en 1990 por Peter Blaha y Karlheinz Schwarz del Instituto de Química de Materiales de la Universidad Tecnológica de Viena. Este código permite realizar cálculos de estructura electrónica de los sólidos utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)^(2,3). Esta basado en el método LAPW⁽⁴⁾, que es uno de los esquemas más precisos para el cálculo de estructura electrónica de bandas. Se utilizó la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA)⁽⁵⁾ para la perovskita 3D, la cual ha mostrado muy buenos resultados para el cálculo de estructuras semiconductoras con enlaces covalentes, y la Aproximación de la Densidad Local (LDA)⁽⁶⁾ para la 2D, ya que ha mostrado buenos resultados para materiales 2D y por capas con interacciones de Van der Waals.

Resultados:

Moléculas Orgánicas

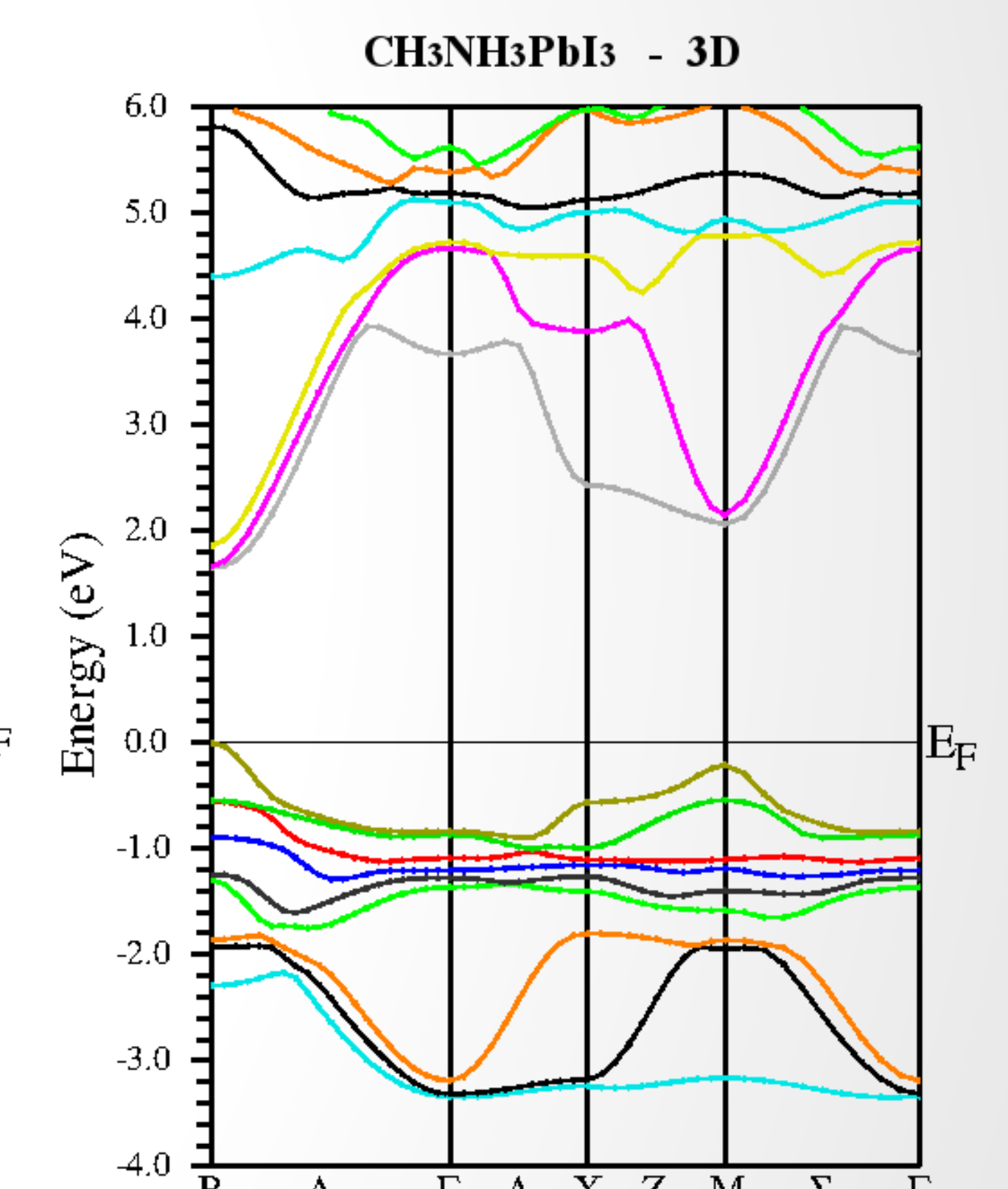
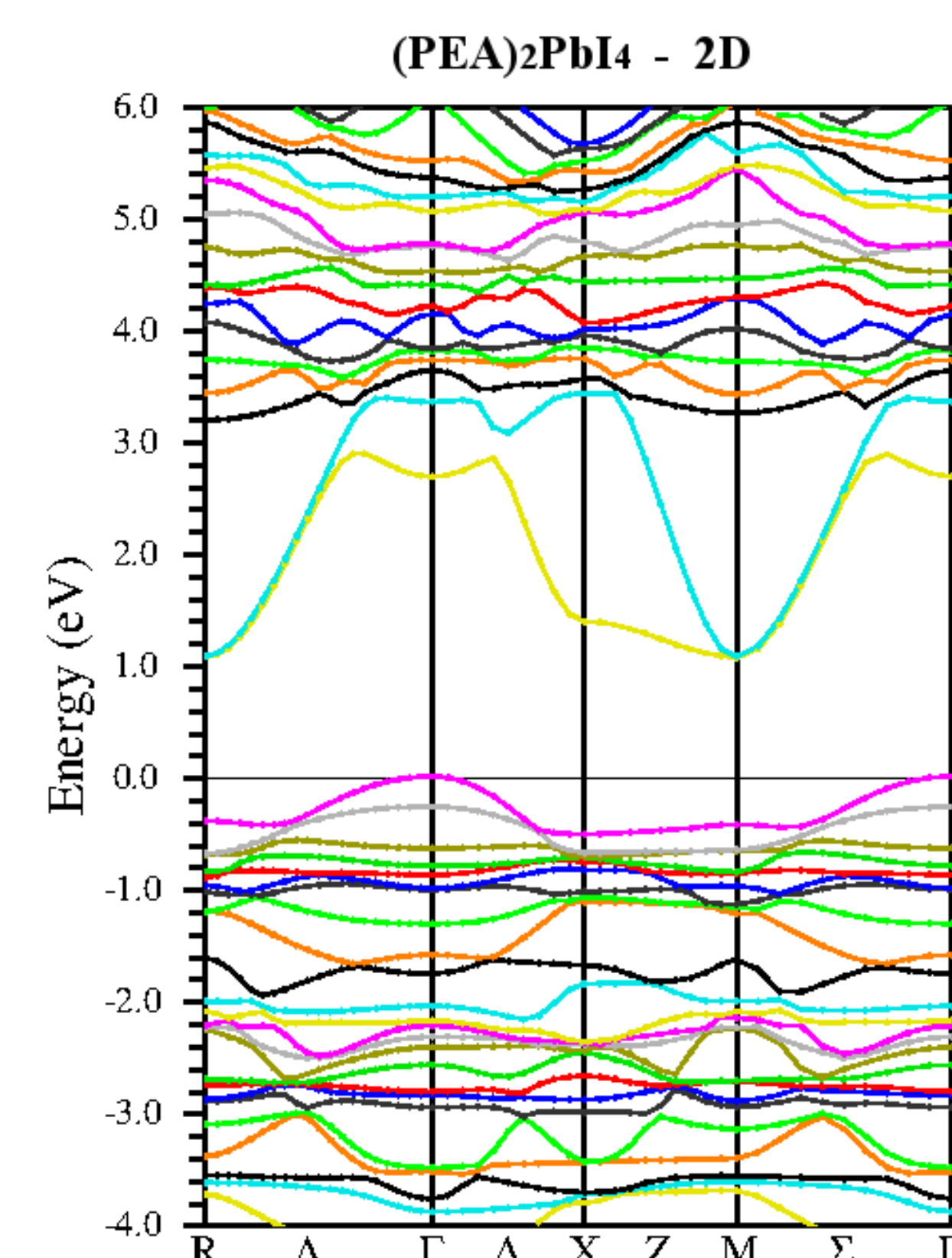
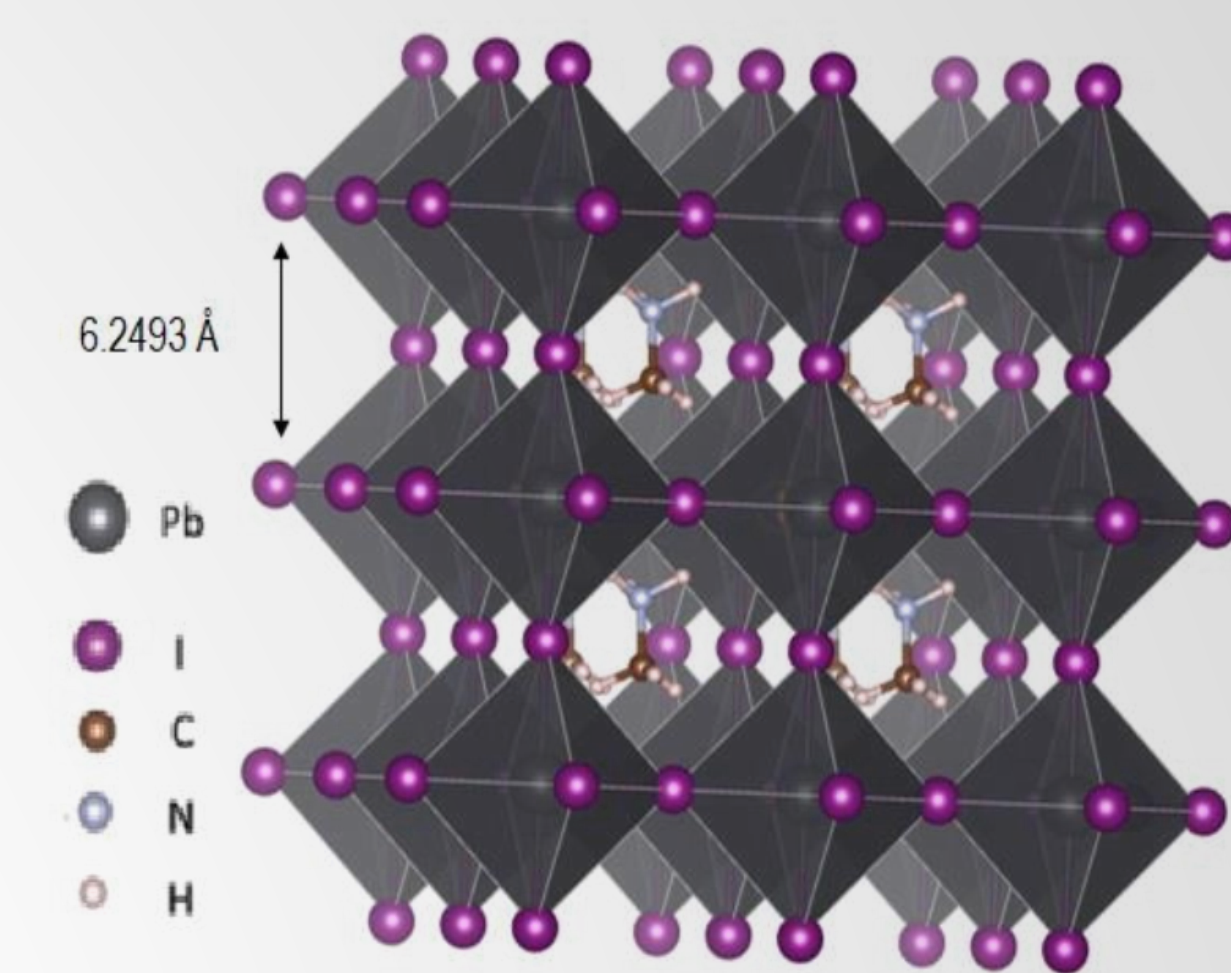


Perovskitas Ruddlesden-Popper



Perovskitas 2D

MAPbI₃



	(PEA) 2PbI_4		MAPbI ₃	
	LDA/tetra	LDA/orto	GGA/tetra	GGA/orto
a (Å)	6.346	----	6.276	6.257
b (Å)	6.346	----	6.276	6.282
c (Å)	14.851	----	6.370	6.366
Gap (eV)	1.546	----	1.381	1.504

Referencias:

- (1) K. Watanabe, T. Taniguchi, and H. Kanda, Nat. Mater. 3, 404 (2004).
- (2) P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka. WIEN2K. (Techn. Universität Wien, Austria, 2013).
- (3) P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
- (4) W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
- (5) G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöstedt, and L. Nordström, Phys. Rev. B 64, 195134 (2001).
- (6) J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).