

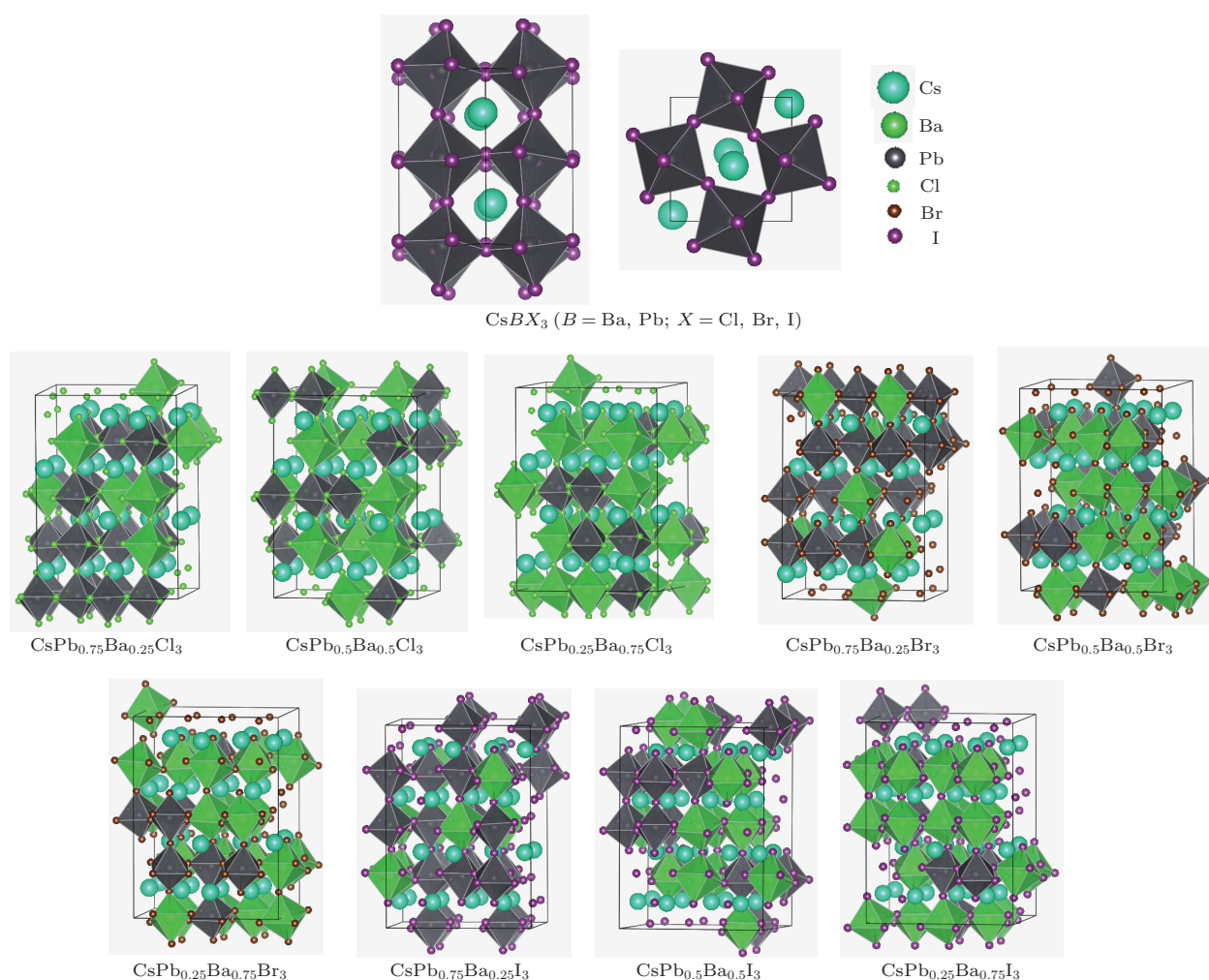
钡作为掺杂元素调控铅基钙钛矿材料的 毒性和光电特性*

王雪婷¹⁾ 付钰豪²⁾ 那广仁²⁾ 李红东^{1)†} 张立军^{1)2)‡}

1) (吉林大学, 超硬材料国家重点实验室和物理学院, 长春 130012)

2) (吉林大学, 汽车材料教育部重点实验室和材料科学与工程学院, 长春 130012)

图S1和表S1分别给出了CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)的晶体结构和晶胞参数.



图S1 CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)的晶体结构

Fig. S1. Crystal structures of the alloyed perovskite CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1).

* 国家自然科学基金优秀青年基金 (批准号: 61722403) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hdli@jlu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: lijun_zhang@jlu.edu.cn

表 S1 CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) 的晶体结构信息

Table S1. Structural data of the alloyed perovskite CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1).

		<i>x</i>				
		0	0.25	0.5	0.75	1
CsPb _{1-x} Ba _x Cl ₃	<i>a</i> /Å	7.993	8.066	8.216	8.319	8.216
	<i>b</i> /Å	11.365	11.526	11.555	11.630	11.894
	<i>c</i> /Å	7.953	7.994	8.03	8.089	8.306
	α/(°)	90	90.003	89.965	90.033	90
	β/(°)	90	90.013	90.044	90.028	90
	γ/(°)	90	89.977	90.045	89.994	90
	<i>V</i> /Å ³	722.49	743.30	762.17	782.70	811.73
CsPb _{1-x} Ba _x Br ₃	<i>a</i> /Å	8.388	8.546	8.740	8.854	8.820
	<i>b</i> /Å	11.978	12.056	12.148	12.245	12.480
	<i>c</i> /Å	8.353	8.334	8.359	8.443	8.691
	α/(°)	90	89.999	89.969	90.073	90
	β/(°)	90	89.997	89.965	90.047	90
	γ/(°)	90	89.973	90.032	89.988	90
	<i>V</i> /Å ³	839.34	858.60	887.54	915.36	956.59
CsPb _{1-x} Ba _x I ₃	<i>a</i> /Å	9.021	9.206	9.362	9.493	9.527
	<i>b</i> /Å	12.768	12.812	12.888	13.004	13.349
	<i>c</i> /Å	8.760	8.778	8.862	8.938	9.068
	α/(°)	90	89.948	89.976	89.897	90
	β/(°)	90	89.914	89.973	89.970	90
	γ/(°)	90	90.061	89.983	89.999	90
	<i>V</i> /Å ³	1008.99	1035.42	1069.35	1103.38	1153.37

结合能的计算公式如下:

$$\Delta E(x) = E(\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{X}_3) - E(\text{Cs}) - (1-x)E(\text{Pb}) - xE(\text{Ba}) - 3E(\text{X}), \quad X = \text{Cl, Br, I}, \quad (1)$$

其中, $E(\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{X}_3)$ 表示的 CsPb_{1-x}Ba_xX₃ 能量; $E(\text{Cs})$, $E(\text{Pb})$, $E(\text{Ba})$, $E(\text{X})$ 分别为自由原子 Cs, Pb, Ba, X 的能量. 化合物的结合能越低, 结构越稳定. 计算结果如图 S2 所示.

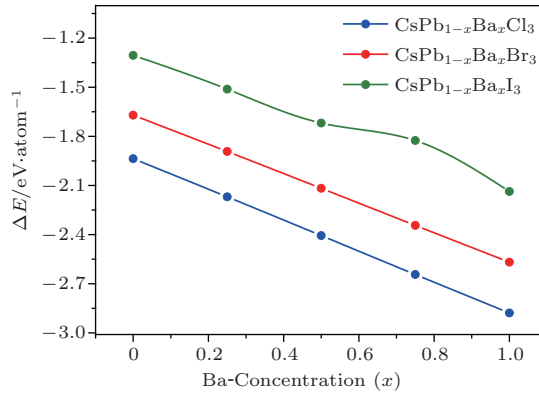


图 S2 计算得到的 CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) 合金钙钛矿体系的结合能

Fig. S2. DFT-calculated binding energies of the alloyed perovskite CsPb_{1-x}Ba_xX₃ (X = Cl, Br, I; x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1).

图 S3 和图 S4 分别给出了 CsPb_{1-x}Ba_xCl₃ 和 CsPb_{1-x}Ba_xBr₃ (x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) 合金钙钛矿体系的投影态密度.

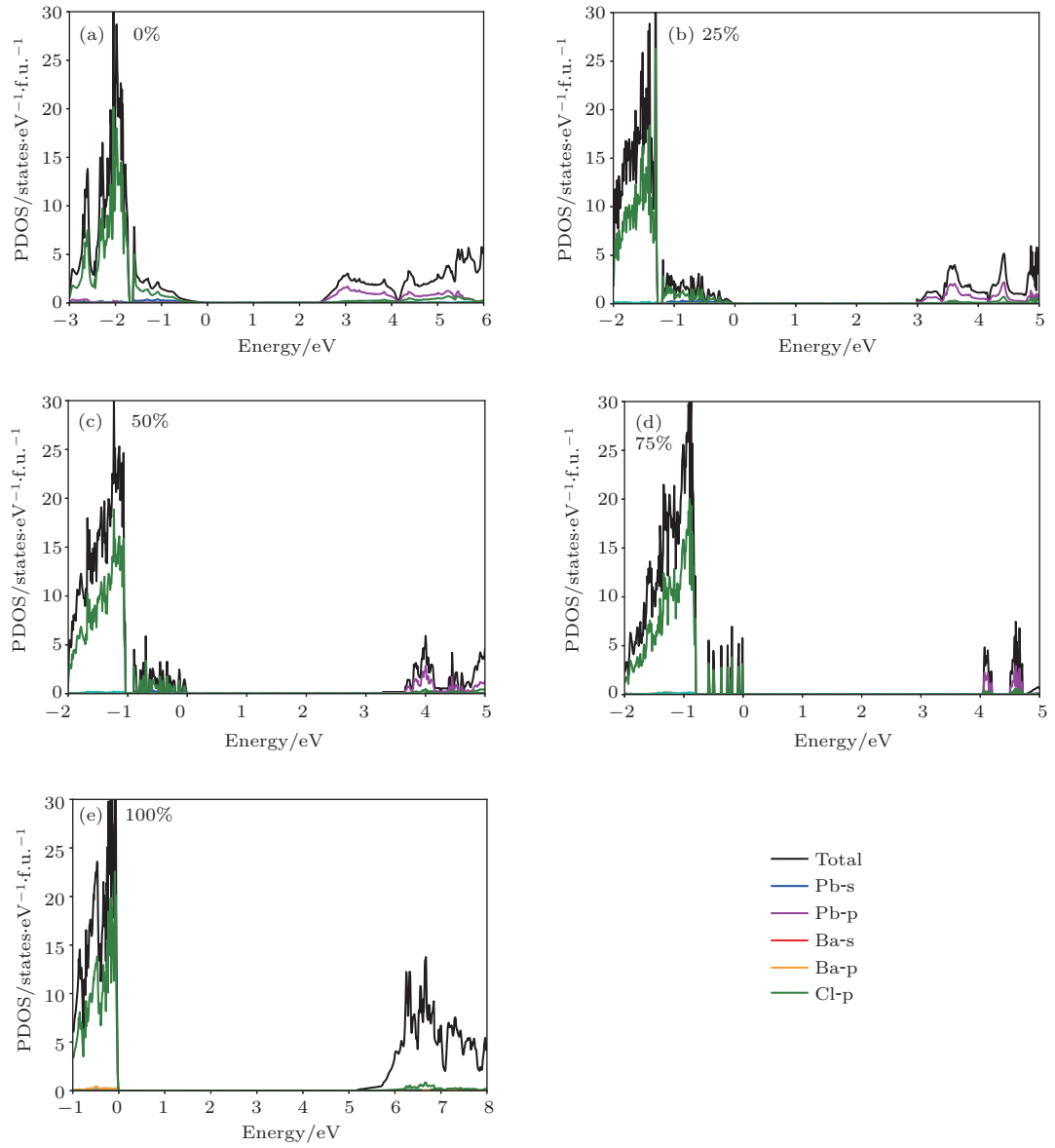
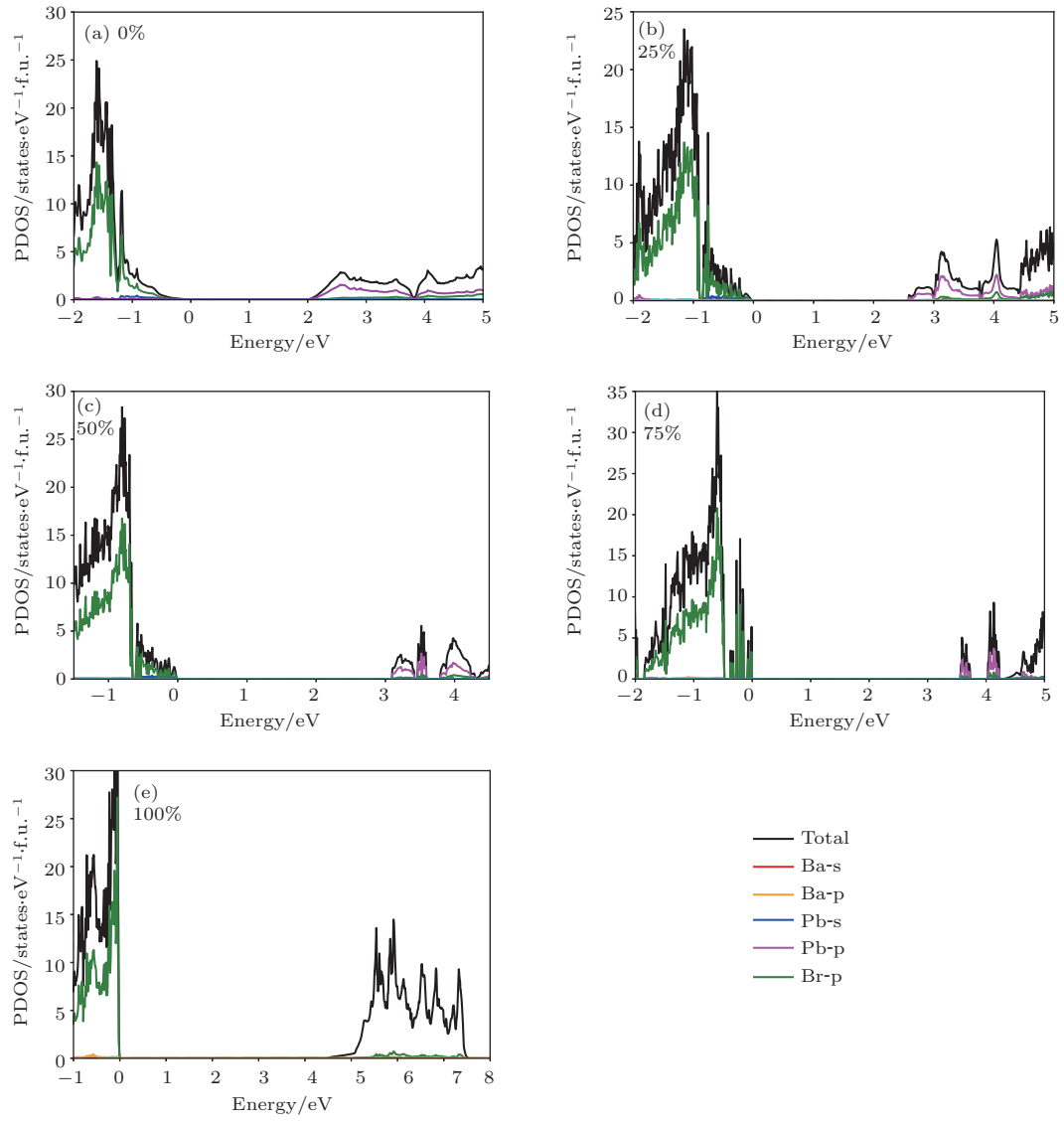


图 S3 计算得到的 $\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Cl}_3$ 合金钙钛矿体系的投影态密度 (a) $x = 0\%$; (b) $x = 25\%$; (c) $x = 50\%$; (d) $x = 75\%$; (e) $x = 100\%$

Fig. S3. Calculated atomic-orbital-projected density of states (PDOS) of the alloyed perovskite $\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Cl}_3$: (a) $x = 0\%$; (b) $x = 25\%$; (c) $x = 50\%$; (d) $x = 75\%$; (e) $x = 100\%$.



图S4 计算得到的 $\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Br}_3$ 合金钙钛矿体系的投影态密度 (a) $x = 0\%$; (b) $x = 25\%$; (c) $x = 50\%$; (d) $x = 75\%$; (e) $x = 100\%$

Fig. S4. Calculated atomic-orbital-projected density of states (PDOS) of the alloyed perovskite $\text{CsPb}_{1-x}\text{Ba}_x\text{Br}_3$: (a) $x = 0\%$; (b) $x = 25\%$; (c) $x = 50\%$; (d) $x = 75\%$; (e) $x = 100\%$.