Materiallar to'plami · Conference Proceedings
"ZAMONAVIY TADQIQOTLAR VA BARQAROR RIVOJLANISH" respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi
04 August 2026
UDK 53
TABIIY FANLAR

$CsMnCl_3$ VA CsMn(Cl0,963Br0,037)3 PEROVSKITLARINING ELEKTRON TUZILISHI VA OPTIK XOSSALARINI DFT ASOSIDA TADQIQ QILISH

Komiljon Ruzmetovich Yakubov[a,*], Davron Shavkatovich Kurbanov[b], XIA HAO[c], Nasibaxon Muxtorbek qizi Nazarova[d]

[a] *1Abu Rayxon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti Fizika-matematika fakulteti dotsent, PhD*
[b] *Abu Rayxon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti Fizika-matematika fakulteti, katta o'qituvchi PhD*
[c] *Yangi energiya va past uglerodli texnologiyalar instituti hamda Materialshunoslik va muhandislik kolleji, Sichuan universiteti, Chengdu 610065, Xitoy*
[d] *Abu Rayxon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti Tayanch doktarant PhD*
✉ yakubovkomiljon419@gmail.com

ANNOTATSIYA

Ushbu tadqiqotda qo'rg'oshinsiz galogenli perovskit materiallari hisoblangan $CsMnCl_3$ hamda Br atomi bilan 3,7 % ga qisman almashtirilgan CsMn(Cl0,963Br0,037)3 birikmalarining elektron tuzilishi va optik xossalari zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosida o'rganildi. Hisoblashlarda modifikatsiyalangan struktura uchun 45 atomdan iborat superyacheyka modeli qo'llanilib, u 9 ta Cs atomi, 9 ta Mn atomi, 26 ta Cl atomi va 1 ta Br atomidan tashkil topgan. Hisoblash jarayonida Br atomining kiritilishi materialning taqiqlangan zona kengligiga hamda optik yutilish koeffitsientiga sezilarli ta'sir ko'rsatishi aniqlandi. Zona struktura tahliliga ko'ra, $CsMnCl_3$ uchun taqiqlangan zona kengligi 4.46 eV ni, CsMn(Cl0,963Br0,037)3 uchun esa 4.32 eV ni tashkil etadi. Optik yutilish spektri Br bilan modifikatsiya qilingan strukturaning ko'zga ko'rinadigan sohaga yaqinroq yutilish koeffitsiyentiga ega ekanligini ko'rsatdi. Olingan natijalar galogen atomlarini qisman almashtirish orqali perovskit materiallarning optoelektron xossalarini samarali boshqarish mumkinligini ko'rsatdi.

Kalit so'zlar

perovskit, $CsMnCl_3$, taqiqlangan zona energiyasi, CsMn(Cl0, 963Br0, 037)3, optik yutilish, DFT, galogen almashtirish.

DOI: 10.5281/zenodo.21743446

KIRISH

So'nggi yillarda metall–galogenid perovskit materiallar o'zining yuqori darajadagi optik va elektron xossalari sababli quyosh elementlari, yorug'lik chiqaruvchi diodlar, fotodetektorlar hamda rentgen nurlarini qayd etuvchi sintillatsion qurilmalarda keng miqyosda tadqiq qilinmoqda[1-4] . Biroq an'anaviy qo'rg'oshin (Pb) asosidagi perovskitlarning toksikligi va atrof-muhitga salbiy ta'siri ularning keng ko'lamli amaliy qo'llanilishini sezilarli darajada cheklaydi[1, 3-8]. Shu bois ekologik jihatdan xavfsiz, barqaror va yuqori samaradorlikka ega bo'lgan qo'rg'oshinsiz perovskit materiallarni ishlab chiqish zamonaviy materialshunoslikning dolzarb ilmiy muammolaridan biri hisoblanadi.

Qo'rg'oshinsiz perovskitlar orasida marganets (Mn) asosidagi to'liq noorganik perovskitlar alohida e'tiborga loyiqdir[9]. Xususan, $CsMnCl_3$ birikmasi o'zining mustahkam kristall tuzilmasi, yuqori termik va kimyoviy barqarorligi hamda Mn^{2+} ionlaridagi lokal d–d elektron o'tishlar bilan bog'liq kuchli fotolyuminessensiya xossalari bilan ajralib turadi. Ushbu xususiyatlar $CsMnCl_3$ ni yorug'lik chiqaruvchi qurilmalar, sintillatsiya detektorlari va radiatsiyani qayd etish qurilmalari uchun istiqbolli material sifatida ko'rsatadi[10].

Oldingi eksperimental tadqiqotlarda $CsMnCl_3$ ning mikro va nanokristall shakllari muvaffaqiyatli sin-

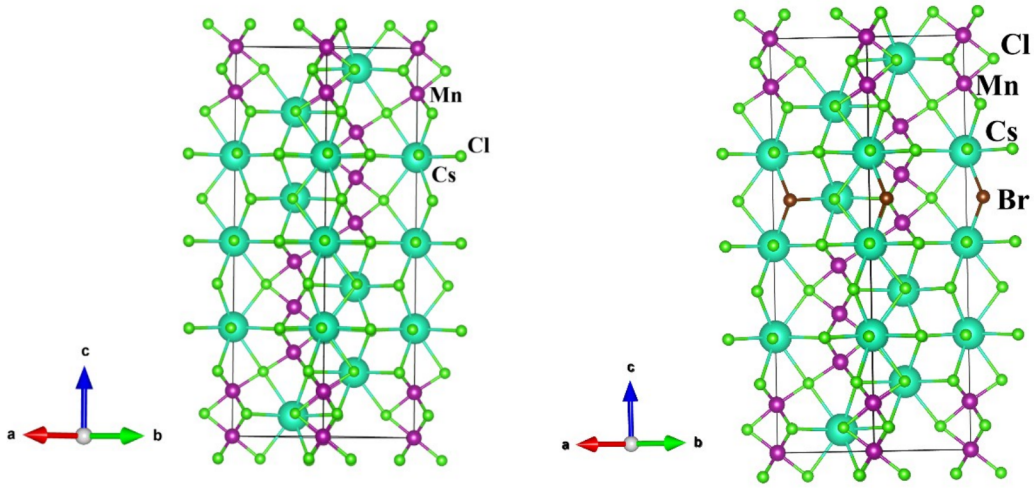
tez qilingan hamda ularning fotolyuminessensiya va sintillatsion xossalari namoyon etilgan [1,3,4,6,8]. Shunga qaramay, ushbu materialning elektron tuzilmasi, taqiqlangan zona energiyasi, orbital xossalari va optik xususiyatlari o‘rtasidagi bog‘liqlik hali to‘liq yoritilmagan. Ayniqsa, kristall panjara parametrlari va lokal elektron muhitning optik xossalarga ta’siri chuqur nazariy tahlilni talab etadi.

Zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosidagi dastlabki hisoblashlar materiallarning fundamental fizik xossalarini atom darajasida tushuntirish imkonini beradi. Zonaviy struktura, holatlar zichligi (DOS), qisman holatlar zichligi (PDOS), elektron lokalizatsiya funksiyasi (ELF) hamda Bader zaryad tahlili orqali $CsMnCl_3$ birikmasidagi kimyoviy bog‘lanish tabiati, zaryad taqsimoti va elektronlarning fazoviy lokalizatsiyasi aniqlanishi mumkin. Bundan tashqari, dielektrik funksiya, yutilish koeffitsiyenti va sinish ko‘rsatkichi kabi optik parametrlarni hisoblash materialning optoelektron va sintillatsion detektorlar hamda radiatsiyani qayd etish qurilmalaridagi imkoniyatlarini baholashda muhim ahamiyat kasb etadi[3,7].

Ushbu ishda $CsMnCl_3$ perovskit birikmasining strukturaviy, elektron va optik xossalari DFT usuli yordamida tizimli ravishda o‘rganildi. Olingan natijalar $CsMnCl_3$ ning taqiqlangan zona tabiati, Mn 3d va Cl 3p orbitallarining elektron tuzilmani shakllantirishdagi o‘rni hamda asosiy optik o‘tishlar mexanizmini aniqlash imkonini berdi. Ushbu tadqiqot natijalari $CsMnCl_3$ ning qo‘rg‘oshinsiz perovskit material sifatidagi fundamental imkoniyatlarini kengaytirib, uni kelajakdagi optoelektron va sintillatsion qurilmalarda qo‘llash uchun mustahkam nazariy asos yaratadi.

TADQIQOT METODOLOGIYASI

Materiallarning elektron tuzilishini o‘rganish uchun zichlik funksional nazariyasi - DFT qo‘llanildi. Hisoblashlar VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) dasturi yordamida bajarildi. Elektron almashinuv-korrelyatsiya potensialini tavsiflash uchun GGA (Generalized Gradient Approximation) – PBE funksionali qo‘llanildi.Taqiqlangan zona va yutilish koeffitsiyentini hisoblashda HSE06 (Heyd Scuseria Ernzerhof 2006) gibrid funksiyasidan foydalanildi. Ion yadrolari va valent elektronlar o‘zaro ta’sirini tavsiflash uchun PAW (Projector Augmented Wave) potensiallari ishlatildi. Hisoblashlarda modifikatsiyalangan struktura uchun 45 atomdan iborat superyacheyka modeli qo‘llanilib, u 9 ta Cs atomi, 9 ta Mn atomi, 26 ta Cl atomi va 1 ta Br atomidan tashkil topgan. 1-rasmda $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ birikmasining VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) ilovasida olingan tasviri ko’rsatilgan.



1. b)

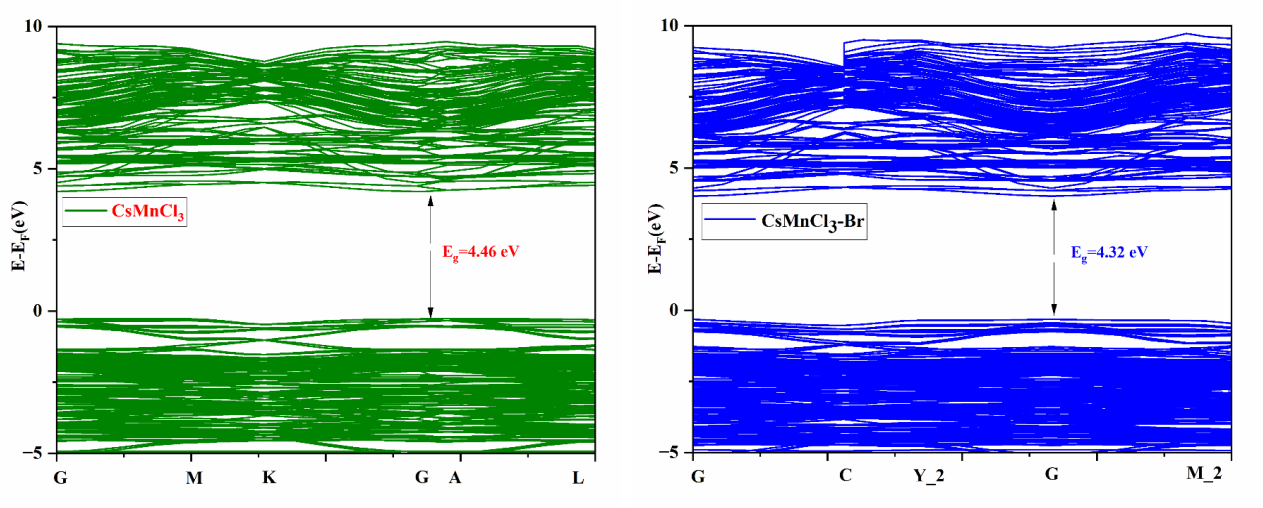
1-rasm. VESTA ilovasida a) $CsMnCl_3$ va b)$CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ birikmalari superyacheykalari uchun olingan tasvir

Hisoblash jarayoni quyidagi bosqichlarni o‘z ichiga oldi:

Kristall panjaraning yuqori simmetriya nuqtalari bo‘ylab energiya zonalari hisoblandi. Hisoblash natijalari asosida elektron energiya spektri hamda optik o‘tish jarayonlari tahlil qilindi

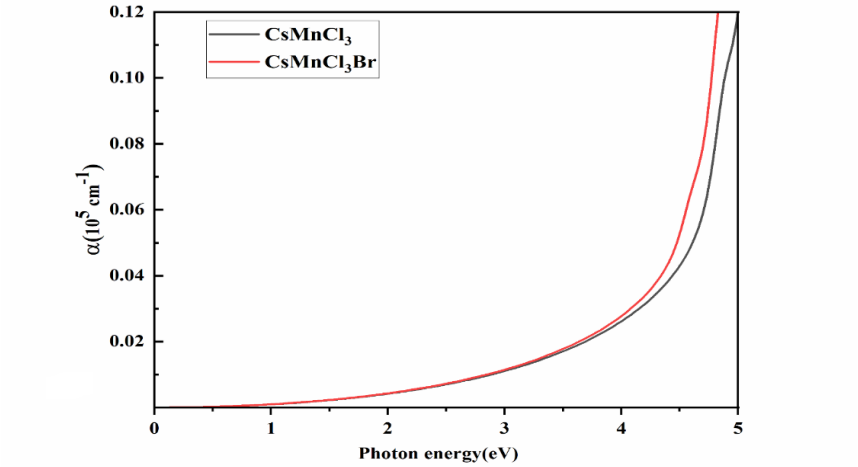
NATIJA VA MUHOKAMALAR

Taqiqlangan zona energiyasi qiymatining kamayishi Br atomining atom radiusi kattaroq bo‘lishi hamda uning elektron orbitalari kristall panjaradagi boshqa atom orbitalari bilan kuchliroq gibridlanishi bilan izohlanadi. Bu esa valent zona maksimumi va o‘tkazuvchanlik zona minimumi orasidagi energiya farqining kamayishiga olib keladi. Shuningdek Br atomining kiritilishi kristall panjaradagi lokal potensialni o‘zgartirib, elektron energiya darajalarining qayta taqsimlanishiga sabab bo‘ladi. 2-rasmda $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ birikmalarining elektron energiya zonalari tasvirlangan.



2-rasm. $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ perovskitlarining energiya zonalari.

Zona struktura tahlili shuni ko‘rsatadiki, har ikki material yarimo‘tkazgich xossalariga ega. $CsMnCl_3$ birikmasi uchun hisoblangan taqiqlangan zona kengligi quyidagiga teng: Eg = 4.46 eV Cl atomining qisman Br bilan almashtirilishi natijasida ushbu qiymat biroz kamayib: Eg = 4.32 eVni tashkil etdi. 3-rasmda $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ materiallari uchun optik yutilish koeffitsienti grafigi keltirilgan.



3-rasm. $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ materiallari uchun optik yutilish koeffitsientining foton energiyasiga bog‘liqligi

Optik yutilish koeffitsienti materialning elektromagnit nurlanishni qanchalik samarali yutishini tavsiflaydi. Hisoblash natijalari shuni ko‘rsatadiki, har ikki material uchun yutilish koeffitsienti foton energiyasi ortishi bilan ortib boradi. Natijalarga ko‘ra: $CsMn(Cl_{0,963}Br_{0,037})_3$ strukturasi yuqoriroq optik yutilish koeffitsientiga ega. yutilish asosan 4–5 eV energiya sohasida keskin ortadi. Br atomining kiritilishi optik o‘tish ehtimolini oshiradi. Bu holat elektronlarning valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasiga o‘tishi ehtimolining ortishi bilan bog‘liq.

XULOSA

Tadqiqotda $CsMnCl_3$ va $CsMn(Cl_{0.963}Br_{0.037})_3$ perovskit materiallarining elektron tuzilishi hamda optik xossalari birinchi tamoyillar asosida tadqiq etildi. Olingan natijalar asosida quyidagi xulosalar shakllantirildi: $CsMnCl_3$ birikmasining taqiqlangan zona kengligi 4.46 eV bo‘lishi hisoblandi. Bu natija eksperiment bilan mos kelishi tasdiqlandi. Cl atomining 3,7% miqdorda Br atomiga qisman almashtirilishi natijasida taqiqlangan zona kengligi qiymati 4.32 eV gacha kamayadi. $CsMn(Cl_{0.963}Br_{0.037})_3$ strukturasida optik yutilish koeffitsienti nisbatan yuqori qiymatlarga ega ekanligi aniqlandi. Galogen atomlarini qisman almashtirish orqali perovskit materiallarning elektron va optik xossalarini samarali tarzda sozlash mumkinligini aniqlandi.

Mazkur natijalar tadqiq qilingan materiallarning quyosh elementlari, fotodetektorlar hamda ultrabinafsha diapazonida ishlovchi optik qurilmalarda qo‘llash uchun muhim ilmiy-nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO’YXATI

1. “All-Inorganic Manganese-Based CsMnCl3 Nanocrystals for X-Ray Imaging” Lin-Quan Guan, Shuo Shi, Xiao-Wei Niu, Shi-Chen Guo, Jian Zhao, Tian-Meng Ji, Hao Dong, Feng-Yan Jia, Jia-Wen Xiao, Ling-Dong Sun, Chun-Hua Yan First published: 24 April 2022

   https://doi.org/10.1002/advs.202201354

2. Large-Area Stable Flexible X-Ray Scintillation Screens with Group IIB Ions Doped CsMnCl3 Microcrystals Wenqing Liang, Huimin Tong, Jingwei Zhu, Xia Hao, Cong Chen, Shengqiang Ren, Min Wu 01 April 2025 https://doi.org/10.1002/lpor.202402306
3. “Role of CsMnCl3 Nanocrystal Structure on Its Luminescence Properties” Anastasia Matuhina, G. Krishnamurthy Grandhi, Fang Pan, Maning Liu ACS Applied Nano Materials Vol 6/Issue 2 Article January 5, 2023
4. Upconversion luminescence in doped Spectroscopy, dynamics, and mechanisms Rafael Valiente; Oliver S. Wenger; Hans U. Güdel Volume 116, Issue 12 22 March 2002
5. “Optical and conduction mechanism study of lead-free CsMnCl3 perovskite” Moufida Krimi , Mehdi Akermi , Rym Hassani , Abdallah Ben Rhaiem Solid State Sciences Volume 155, September 2024, 107646
6. “Zn2+-Doped Lead-Free CsMnCl3 Nanocrystals Enable Efficient Red Emission with a High Photoluminescence Quantum Yield” Xuerong Hao, Hongli Liu, Weigang Ding, Fei Zhang, Xianggao Li, Shirong Wang The Journal of Physical Chemistry Letters Vol 13/Issue 21 Physical Insights Into Materials and Molecular Properties May 23, 2022
7. Cesium manganese chloride: Stable lead-free perovskite from bulk to single layer Yigit Sozen , Sercan Ozen , Hasan Sahin Journal of Magnetism and Magnetic Materials Volume 531, 1 August 2021, 167845
8. Lead-Free CsMnCl3 Nanoparticles with Tunable Dual Fluorescence for Light- Emitting Applications Ben Aizenshtein, Rivka Gartner, Ido Hadar October 15. 2025
9. “Reverse synthesis of CsPbxMn1−x(Cl/Br)3 perovskite quantum dots from CsMnCl3 precursors through cation exchange” Gaoliang Fang, Daqin Chen, Su Zhou, Xiao Chen, Lei Lei, Jiasong Zhonga and Zhenguo Ji 11 May 2018 https://doi.org/10.1039/C8TC01426D
10. “Mn2+-Mn²+ Magnetic Coupling Effect on Photoluminescence Revealed by Photomagnetism in CsMnCl3” Xinglu Zhu, Suqian Meng, Yifei Zhao, Shuai Zhang and etc. The Journal of Physical Chemistry Letters Physical Insights Into Materials and Molecular Properties Vol 11/Issue 22 October 29, 2020