



UO‘K 538.915:539.182:620.383

[https://doi.org/10.70769/2181-2284.ME.3\(24\).2026.6](https://doi.org/10.70769/2181-2284.ME.3(24).2026.6)

CsMnCl₃ VA CsBX₃ PEROVSKITLARINING ELEKTRON VA OPTIK XOSSALARINI ZICHLIK FUNKSIONALI NAZARIYASI (DFT) ASOSIDA TADQIQ ETISH

Nazarova Nasibaxon Muxtorbek qizi- tayanch doktorant,
<https://orcid.org/0009-0002-7192-9362> e-mail: nasibaxonnazarova895@gmail.com

Yakubov Komiljon Ruzmetovich-PhD, professor,
<https://orcid.org/0000-0002-7577-943X> e-mail: yakubovkomiljon419@gmail.com

Kurbanov Davron Shavkatovich-PhD, katta o‘qituvchi,
<https://orcid.org/0000-0003-1557-9927> e-mail: davronkurbanow89@gmail.com

Aminov Doniyorbek Rashidovich -tayanch doktorant
<https://orcid.org/0009-0008-4893-9734> e-mail: donush201994@gmail.com

Abu Rayxon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti, Urganch sh., O‘zbekiston

Annotatsiya. Kirish. Mazkur maqolada qo‘rg‘oshinsiz CsMnCl₃ hamda CsBX₃ (B = Sn, Ge, Mg; X = Cl, Br) tipidagi galogenid perovskitlarning elektron va optik xossalari bo‘yicha mavjud ilmiy tadqiqotlar tahlil qilindi. Zichlik funksionali nazariyasi (DFT) yordamida aniqlangan elektron zona tuzilishi, taqiqlangan zona energiyasi, holatlar zichligi va optik parametrlar umumlashtirilib, ularning optoelektronik hamda fotovoltaiik qurilmalarda qo‘llash istiqbollari baholandi.

Materiallar va usullar. Tadqiqotda qo‘rg‘oshinsiz CsMnCl₃ hamda CsBX₃ (B = Sn, Ge, Mg; X = Cl, Br) perovskitlari bo‘yicha 2020-2026-yillarda chop etilgan ilmiy maqolalar tahlil qilindi. Elektron va optik xossalar zichlik funksionali nazariyasi (DFT), GGA, GGA+U, mBJ hamda FP-LAPW hisoblash yondashuvlari asosida olingan natijalar qiyosiy baholandi.

Natijalar. Tahlillar CsMnCl₃ va CsBX₃ tipidagi perovskitlarning elektron va optik xossalari kristall tuzilishi, almashinuv-korrelyatsiya funksionali hamda B-kationining turiga sezilarli darajada bog‘liq ekanligini ko‘rsatdi. Taqiqlangan zona energiyasi, elektron zona tuzilishi ko‘rsatkichlaridagi farqlar ushbu materiallarning optoelektronik va fotovoltaiik qurilmalarda qo‘llash imkoniyatlarini baholashga asos bo‘ldi.

Xulosa. Olingan ilmiy xulosalar yuqori samaradorlikka ega, ekologik xavfsiz va barqaror yangi avlod fotoaktiv materiallarni loyihalash hamda optimallashtirish uchun muhim nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

Kalit so‘zlar: qo‘rg‘oshinsiz perovskitlar, CsMnCl₃, CsBX₃, zichlik funksionali nazariyasi, DFT, elektron zona tuzilishi, taqiqlangan zona energiyasi, holatlar zichligi, optik xossalar, fotovoltaiika.

Дата поступления: 04.08.2026. После обработки: 26.08.2026 Принято печать: 23.09.2026

For citation: Nazarova N.M., Yakubov K.R., Kurbanov D.Sh., Aminov D.R. Investigation of the Electronic and Optical Properties of CsMnCl₃ AND CsBX₃ Perovskites based on Density Functional Theory (DFT). Muqobil energetika. 2026. 3(24). pp. 60-66.

УДК 538.915:539.182:620.383

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ CsMnCl₃ И CsBX₃ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ (DFT)

Назарова Насибaxon Мухторбек кизи - базовый докторант,
<https://orcid.org/0009-0002-7192-9362> e-mail: nasibaxonnazarova895@gmail.com

Якубов Комижон Рузметович¹ – PhD, профессор,
<https://orcid.org/0000-0002-7577-943X> e-mail: yakubovkomiljon419@gmail.com

Курбанов Даврон Шавкатович – PhD, старший преподаватель,
<https://orcid.org/0000-0003-1557-9927> e-mail: davronkurbanow89@gmail.com



Дониербек Аминов Рашидович - базовый докторант
<https://orcid.org/0009-0008-4893-9734> e-mail: donush201994@gmail.com

Ургенчский государственный университет имени Абу Райхана Беруни, г. Ургенч,
Узбекистан

Аннотация: Введение. В настоящей статье проведен анализ современных исследований электронных и оптических свойств бессвинцовых галогенидных перовскитов типа CsMnCl_3 и CsBX_3 ($B=\text{Sn, Ge, Mg}$; $X=\text{Cl, Br}$). Обобщены результаты исследований электронной зонной структуры, ширины запрещенной зоны, плотности электронных состояний и оптических параметров, полученные с использованием теории функционала плотности (DFT), а также рассмотрены перспективы применения данных материалов в оптоэлектронных и фотоэлектрических устройствах.

Материалы и методы. В работе проанализированы научные публикации, посвященные бессвинцовым перовскитам CsMnCl_3 и CsBX_3 ($B=\text{Sn, Ge, Mg}$; $X=\text{Cl, Br}$), опубликованные в 2020-2026 годах. Проведено сравнительное рассмотрение результатов расчетов электронных и оптических свойств, выполненных методами теории функционала плотности (DFT) с использованием подходов GGA, GGA+U, mBJ и FP-LAPW.

Результаты. Анализ показал, что электронные и оптические свойства перовскитов CsMnCl_3 и CsBX_3 существенно зависят от кристаллической структуры, выбора обменно-корреляционного функционала и природы В-катиона. Различия в значениях ширины запрещенной зоны и особенностях электронной зонной структуры позволяют оценить перспективность данных материалов для применения в оптоэлектронике и фотоэлектрических преобразователях энергии.

Заключение. Полученные научные результаты свидетельствуют о том, что методы теории функционала плотности являются эффективным инструментом для исследования и оптимизации бессвинцовых перовскитов. Представленные выводы могут служить теоретической основой для разработки экологически безопасных, стабильных и высокоэффективных фотоактивных материалов нового поколения.

Ключевые слова: бессвинцовые перовскиты, CsMnCl_3 , CsBX_3 , теория функционала плотности, DFT, электронная зонная структура, ширина запрещенной зоны, плотность электронных состояний, оптические свойства, фотовольтаика.

UDC 538.915:539.182:620.383

INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF CsMnCl_3 AND CsBX_3 PEROVSKITES BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Nazarova Nasibakhon Mukhtorbek kizi – PhD Student,
<https://orcid.org/0009-0002-7192-9362> e-mail: nasibaxonnazarova895@gmail.com

Yakubov Komiljon Ruzmetovich – PhD, Professor,
<https://orcid.org/0000-0002-7577-943X> e-mail: yakubovkomiljon419@gmail.com

Kurbanov Davron Shavkatovich – PhD, Senior Lecturer,
<https://orcid.org/0000-0003-1557-9927> e-mail: davronkurbanow89@gmail.com

Aminov Doniyorbek Rashidovich -PhD Student
<https://orcid.org/0009-0008-4893-9734> e-mail: donush201994@gmail.com

Urgench State University named after Abu Rayhan Beruni, Urgench, Uzbekistan

Abstract. Introduction. This paper presents an analysis of recent studies on the electronic and optical properties of lead-free halide perovskites CsMnCl_3 and CsBX_3 ($B = \text{Sn, Ge, Mg}$; $X = \text{Cl, Br}$). The results obtained by Density Functional Theory (DFT), including the electronic band



structure, band gap, density of states, and optical parameters, are summarized, and the potential applications of these materials in optoelectronic and photovoltaic devices are discussed.

Materials and Methods. Scientific publications on lead-free CsMnCl_3 and CsBX_3 ($B = \text{Sn, Ge, Mg}$; $X = \text{Cl, Br}$) perovskites published between 2020 and 2026 were systematically analyzed. The electronic and optical properties reported in the literature were comparatively evaluated based on Density Functional Theory (DFT) calculations using the GGA, GGA+U, mBJ, and FP-LAPW approaches.

Results. The analysis revealed that the electronic and optical properties of CsMnCl_3 and CsBX_3 perovskites strongly depend on their crystal structure, the choice of exchange-correlation functional, and the nature of the B-site cation. Variations in the band gap and electronic band structure provide valuable insights into the suitability of these materials for optoelectronic and photovoltaic applications.

Conclusion. The obtained results demonstrate that Density Functional Theory is an effective theoretical tool for investigating and optimizing lead-free perovskite materials. The findings provide a scientific basis for the development of environmentally friendly, stable, and high-performance photoactive materials for next-generation optoelectronic and photovoltaic technologies.

Keywords: lead-free perovskites, CsMnCl_3 , CsBX_3 , Density Functional Theory, DFT, electronic band structure, band gap, density of states, optical properties, photovoltaics.

Kirish

So'nggi o'n yillikda quyosh energetikasi va optoelektronika sohalarida metall galogenidli perovskitlarga bo'lgan ilmiy qiziqish keskin ortdi. Qo'rg'oshin (Pb) asosidagi perovskitlar yuqori fotoelektrik samaradorlik ko'rsatsa-da, ularning toksikligi va atrof-muhitga salbiy ta'siri amaliy qo'llanmalarni cheklamoqda. Shu sababli qo'rg'oshinsiz, ekologik jihatdan xavfsiz muqobil materiallarni izlash zamonaviy materialshunoslikning dolzarb yo'nalishlaridan biriga aylandi [1-5].

Ushbu nuqtai nazardan CsMnCl_3 galogenidi alohida e'tiborga loyiq: u to'liq noorganik tarkibga ega, biologik toksikligi past va kristall tuzilishi jihatidan barqarordir [1,2]. Mazkur tahliliy ishda CsMnCl_3 va tuzilishi jihatdan o'xshash CsBX_3 ($B = \text{Sn, Ge, Mg}$; $X = \text{Cl, Br}$) tipidagi galogenid perovskitlarning elektron tuzilishi, taqiqlangan zona energiyasi hamda optik xossalarini zichlik funksionali nazariyasi (DFT) usulida o'rgangan so'nggi ilmiy ishlar tahlil qilinadi. Alohida e'tibor legirlovchi elementlarning elektron zona tuzilishi, zaryad tashuvchilar holatlari va optik javobga ta'sirini o'rganishga qaratiladi. Olingan natijalar yuqori samaradorlikka ega qo'rg'oshinsiz perovskitlar asosida yangi avlod optoelektronik va fotovoltaiik materiallarni loyihalash uchun nazariy asos yaratadi [1-7].

CsMnCl_3 perovskitining strukturaviy va elektron xossalari

CsMnCl_3 ning optik va elektr o'tkazuvchanlik xossalari sekin bug'lantirish usuli bilan sintez qilingan monokristallar asosida tajribaviy o'rganilgan. Aniqlanishicha, birikma R-3m fazoviy guruhiga mansub geksagonal singoniyada kristallanadi va uning taqiqlangan zona energiyasi 4.56 eV ni tashkil etadi. Haroratga bog'liq elektr o'tkazuvchanlik tahlili shuni ko'rsatdiki, material 383 K haroratda yarimo'tkazgichdan metall holatiga, 403 K da esa aksincha metall holatdan yarimo'tkazgich holatiga fazaviy o'tishga ega bo'lib, yarimo'tkazgich fazasida zaryad tashuvchilarning ko'chishi yakka polaron sakrashi mexanizmi orqali amalga oshadi [1].

Nazariy tomondan CASTEP dasturiy majmuasi asosida bajarilgan keng qamrovli tadqiqotda GGA-PBE hamda GGA+U yondashuvlari doirasida bir nechta almashinuv-korrelyatsiya funksionali (PBE, RPBE, PW91, WC, PBEsol) o'zaro solishtirilgan. Natijalar shuni ko'rsatdiki, oddiy GGA-PBE hisoblashida CsMnCl_3 metall xossasini namoyon qiladi, biroq Hubbard U tuzatmasi kiritilgach (GGA+U) material $R \rightarrow \Gamma$ yo'nalishida bilvosita taqiqlangan zonaga ega yarimo'tkazgichga aylanadi. Funksionalga qarab hisoblangan taqiqlangan zona energiyasi qiymatlari 1,890–2,041 eV oralig'ida joylashadi, ya'ni nazariy (DFT+U) va tajribaviy (4,56 eV) natijalar orasida sezilarli farq mavjud — bu odatiy DFT+U yaqinlashuvlarining taqiqlangan zona energiyasini kam baholash tendensiyasi bilan izohlanadi va yanada aniqroq natijalar uchun gibril



funksionallar (masalan, HSE06) qo'llanilishi zarurligini ko'rsatadi. Shu bilan birga, ushbu tadqiqotda CsMnCl_3 ning ko'rinadigan spektr sohasida past qaytaruvchanlik, yuqori yutilish koeffitsiyenti va yaxshi optik o'tkazuvchanlikka ega ekanligi, mexanik barqaror va plastik xususiyatga ega ekanligi ham tasdiqlangan [2].

2. Legirlash orqali elektron tuzilmani boshqarish

CsMnCl_3 uchun Bi va F bilan birgalikda legirlash samaradorligini baholashda yaqin qarindosh CsBX_3 tizimlaridagi legirlash tajribasi metodologik jihatdan muhim asos beradi. Xususan, CsPbCl_3 tarkibiga Bi^{3+} va Mn^{2+} ionlarini birgalikda kiritish elektron tuzilmada zaryad tashuvchilarni tutib qolish (carrier trapping) markazlarini hosil qilib, gibrid DFT va spin-orbital ta'sirlashuv (SOC) hisoblari yordamida bu markazlarning energetik joylashuvi aniqlangan [3]. Bu natija Bi^{3+} ionining B-o'rinbosar sifatida kiritilishi taqiqlangan zona ichida qo'shimcha elektron holatlar hosil qilishi mumkinligini ko'rsatib, $\text{CsMnCl}_3\text{:Bi}$ tizimidagi kutilayotgan defekt darajalarini talqin qilishda foydali qiyoslash nuqtasi bo'lib xizmat qiladi.

CsSnCl_3 tarkibiga Ti, V, Cr va Mn o'tish metallarini legirlash bo'yicha DFT+U tadqiqotida (Hubbard $U = 6,5$ eV) legirlangan tizimlarning barchasida elektron zonalar tuzilmasi va optik xossalar sezilarli o'zgarishi, mexanik jihatdan esa barcha namunalar yuqori plastiklikka ega bo'lishi aniqlangan [4]. Bu natija o'tish metali ionlari bilan legirlash CsBX_3 turidagi perovskitlarda umumiy tendensiya sifatida taqiqlangan zona energiyasini tor toraytirish va optik yutilishni kuchaytirish imkonini berishini tasdiqlaydi. Yanada aniqroq misol sifatida CsGeCl_3 ni Mn va Fe bilan legirlash bo'yicha integrallashgan DFT+U va SCAPS-1D qurilma modellashirish tadqiqotini keltirish mumkin. Sof CsGeCl_3 ning taqiqlangan zona energiyasi 3,44 eV bo'lib, fotoelektrik konversiya samaradorligi atigi 5% ni tashkil etadi. Biroq Fe bilan legirlash natijasida elektron zonalar orasida oraliq zona hosil bo'lib, taqiqlangan zona energiyasi 1,21 eV gacha kamayadi, natijada $\text{CsGe}_{0.875}\text{Fe}_{0.125}\text{Cl}_3$ tarkibi uchun SCAPS-1D bashorati bo'yicha PCE 31,6% gacha oshishi mumkin [5]. Ushbu natija shuni ko'rsatadiki, to'g'ri tanlangan legirlovchi element taqiqlangan zona energiyasini maqsadli kamaytirib, fotovoltaiik samaradorlikni tubdan yaxshilashi mumkin. Bi^{3+} ionining CsMnCl_3 panjarasidagi bevosita ta'sirini o'rganishda $\text{Bi}^{3+}/\text{Yb}^{3+}$ birgalikda legirlangan CsMnCl_3 monokristallarida yaqin infraqizil (NIR) lyuminessensiya bo'yicha o'tkazilgan nazariy-eksperimental tadqiqot alohida ahamiyatga ega. Unda Bi^{3+} va Yb^{3+} ionlarining birgalikda kiritilishi panjara simmetriyasining buzilishiga va energiya ko'chish jarayonlariga olib kelishi, natijada yuqori samaradorlikka ega NIR nurlanish kuzatilishi ko'rsatilgan [6]. Bu ma'lumot CsMnCl_3 panjarasida Bi^{3+} ionining koordinatsion muhitni buzib, yangi optik faol markazlar hosil qilish mexanizmini tushuntirishda bevosita dalil sifatida qaraladi.

Nihoyat, tuzilishi jihatidan yaqin bo'lgan CsMgX_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}$) oilasi ustida FP-LAPW usuli va mBJ-GGA yaqinlashuvi asosida o'tkazilgan tadqiqot CsMgCl_3 va CsMgBr_3 uchun mos ravishda 6,35 eV va 4,26 eV kenglikdagi bilvosita taqiqlangan zona energiyasi qiymatlarini bergan, shuningdek bu birikmalarning UV sohasida samarali yorug'lik yutishi va termoelektrik xususiyatlarga ega ekanligini ko'rsatgan [7]. Ushbu natijalar CsBX_3 oilasidagi B-kationi tabiatining (Mg, Ge, Sn, Mn) taqiqlangan zona energiyasi kengligiga bevosita ta'sir qilishini tasdiqlaydi va CsMnCl_3 ning nisbatan tor (tajribada 4,56 eV) taqiqlangan zona energiyasi B-kationi sifatida Mn^{2+} ning o'ziga xos elektron konfiguratsiyasi (d^5) bilan bog'liqligini ko'rsatadi.

3. Natijalarni solishtirish

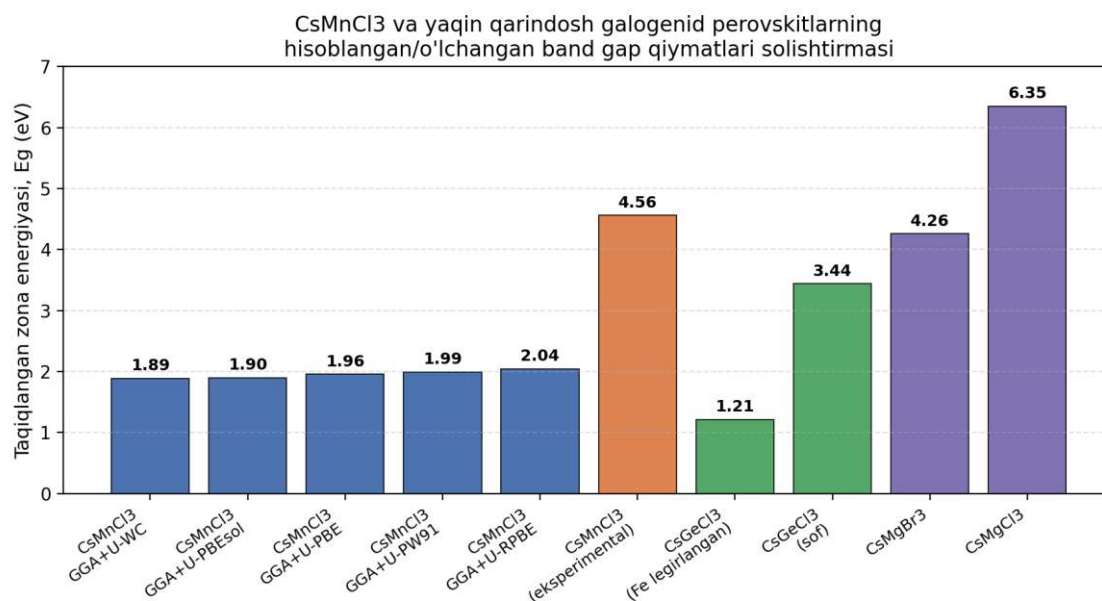
Yuqorida keltirilgan tadqiqotlarda olingan taqiqlangan zona energiyasi qiymatlarini yagona jadvalda solishtirish CsMnCl_3 ning DFT+U va tajribaviy natijalari orasidagi farqni, shuningdek yaqin qarindosh tizimlarda legirlash orqali erishilgan taqiqlangan zona energiyasi o'zgarishlarini yaqqol ko'rsatadi (1-jadval, 1-rasm).



1-jadval.

CsMnCl₃ va CsBX₃ galogenid perovskitlarning taqiqlangan zona energiyasi qiymatlari solishtirmasi

Material	Usul / funksional	Eg, eV	Manba
CsMnCl ₃	GGA-PBE	metall (0)	[2]
CsMnCl ₃	GGA+U-WC	1,890	[2]
CsMnCl ₃	GGA+U-PBEsol	1,895	[2]
CsMnCl ₃	GGA+U-PBE	1,956	[2]
CsMnCl ₃	GGA+U-PW91	1,994	[2]
CsMnCl ₃	GGA+U-RPBE	2,041	[2]
CsMnCl ₃	Eksperimental (yutilish spektri)	4,56	[1]
CsGeCl ₃ (sof)	DFT+U	3,44	[5]
CsGeCl ₃ :Fe (12,5%)	DFT+U	1,21	[5]
CsMgCl ₃	FP-LAPW, mBJ-GGA	6,35	[7]
CsMgBr ₃	FP-LAPW, mBJ-GGA	4,26	[7]



1-rasm. CsMnCl₃ (turli funksionallar va eksperiment) hamda CsGeCl₃, CsMgCl₃, CsMgBr₃ uchun taqiqlangan zona energiyasi qiymatlarining solishtirma diagrammasi

Jadval va grafikdan ko‘rinib turibdiki, GGA+U funksionallari CsMnCl₃ uchun tajribaviy qiymatdan (4,56 eV) taxminan 2,5 baravar past taqiqlangan zona energiyasi beradi — bu holat literatura bo‘yicha GGA+U usulining tipik kamchiligi hisoblanadi va HSE06 kabi gibrid funksionallarni qo‘llash zaruratini asoslaydi. Shu bilan birga, CsGeCl₃:Fe misolida ko‘rsatilganidek, maqsadli legirlash taqiqlangan zona energiyasini deyarli 3 baravar toraytirishga qodir, bu esa CsMnCl₃ ni Bi bilan legirlash orqali UV fotodetektor va optoelektronik qurilmalar uchun optimal taqiqlangan zona energiyasi oralig‘iga (taxminan 1,3–2,0 eV) yaqinlashtirish mumkinligidan dalolat beradi.



№	Taklif va tavsiyalar	Ilmiy asos
1	CsMnCl ₃ va CsBX ₃ (B = Sn, Ge, Mg; X = Cl, Br) perovskitlarining elektron tuzilishini DFT hisoblashlarida GGA, GGA+U va mBJ kabi almashinuv-korrelyatsiya funksionallarini qiyosiy qo'llash	Turli funksionallar taqiqlangan zona energiyasi va elektron tuzilmani turlicha tavsiflaydi, bu esa hisoblash aniqligiga bevosita ta'sir qiladi.
2	Elektron zona tuzilishi bilan bir qatorda umumiy va qisman holatlar zichligini ham kompleks tahlil qilish	Elektron holatlarning kelib chiqishi va atom orbitallarining hissasini aniqlash imkonini beradi.
3	Optik xossalarni baholashda dielektrik funksiyasi, yutilish koeffitsiyenti, sinish ko'rsatkichi, qaytaruvchanlik va optik o'tkazuvchanlikni yagona metodika asosida hisoblash	Materialning fotovoltaiik va optoelektronik qurilmalarda qo'llash imkoniyatini to'liq baholashga xizmat qiladi.
4	CsMnCl ₃ tarkibida Bi, Fe, V, Cr kabi legirlovchi elementlarning elektron va optik xossalarga ta'sirini tizimli ravishda o'rganish.	Legirlash orqali taqiqlangan zona energiyasini boshqarish va yorug'lik yutilishini yaxshilash imkoniyati mavjud.
5	Hisoblash natijalarini mavjud tajribaviy ma'lumotlar bilan solishtirish va validatsiya qilish	Nazariy natijalarning ishonchligini oshiradi va amaliy qo'llash imkoniyatini kuchaytiradi.
6	DFT natijalari asosida SCAPS-1D yoki boshqa modellashtirish dasturlarida quyosh elementi parametrlarini hisoblash	Materialning amaliy fotoelektrik samaradorligini baholash imkonini beradi.
7	Elektron va optik xossalarga kristall tuzilishi hamda B-kationining almashinish ta'sirini qiyosiy tahlil qilish	CsBX ₃ oilasidagi materiallarni optimallashtirish va eng istiqbolli tarkibni tanlash imkonini beradi.
8	Kelgusidagi tadqiqotlarda nuqsonlar, antisite nuqsonlari va deformatsiya ta'sirini DFT asosida o'rganish	Real kristallarda nuqsonlarning elektron va optik xossalarga ta'siri muhim ahamiyatga ega.
9	Hisoblashlarda spin qutblanishi hamda zarur hollarda spin-orbital bog'lanish hisobga olinishi	Ayniqsa Mn va Bi ishtirokidagi tizimlarda elektron tuzilmani aniq tavsiflash imkonini beradi.
10	Olingan nazariy natijalar asosida istiqbolli materiallarni eksperimental sintez qilish va ularning optik hamda elektr xossalarini tekshirish	Nazariya va tajriba o'rtasidagi bog'liqlikni ta'minlaydi hamda yangi qo'rg'oshinsiz fotoaktiv materiallarni yaratishga xizmat qiladi.

Xulosa

O'tkazilgan adabiyotlar tahlili shuni ko'rsatadiki, qo'rg'oshinsiz CsMnCl₃ hamda CsBX₃ (B = Sn, Ge, Mg; X = Cl, Br) tipidagi galogenid perovskitlar ekologik xavfsizligi, yuqori kimyoviy barqarorligi va elektron hamda optik xossalarini boshqarish imkoniyati tufayli zamonaviy optoelektronika va fotovoltaiika sohalarida istiqbolli materiallar hisoblanadi. Mavjud tajribaviy va nazariy tadqiqotlar ushbu birikmalarning kristall tuzilishi, elektron zona tuzilmasi, taqiqlangan zona energiyasi hamda optik xususiyatlari tarkib, kristall simmetriyasi va hisoblash metodologiyasiga sezilarli darajada bog'liq ekanligini ko'rsatadi.

Tahlillarda CsMnCl₃ hamda ayrim CsBX₃ tizimlarining strukturaviy, elektron va optik xossalari alohida o'rganilgan bo'lsa-da, ularni yagona metodologik yondashuv asosida o'zaro qiyoslash, elektron tuzilma va optik parametrlar o'rtasidagi bog'liqlikni kompleks baholash hamda turli B-kationlar ta'sirini tizimli ravishda tahlil qilish bo'yicha tadqiqotlar yetarli darajada yoritilmagan.



Shu nuqtai nazardan, zichlik funksionali nazariyasi (DFT) asosida CsMnCl_3 va CsBX_3 tipidagi qo'rg'oshinsiz perovskitlarning elektron hamda optik xossalarini kompleks tadqiq etish ularning zona tuzilishi, holatlar zichligi, taqiqlangan zona energiyasi, dielektrik funksiyasi, yutilish koeffitsiyenti, sinish ko'rsatkichi va optik o'tkazuvchanligi kabi muhim fizik parametrlarini aniqlash hamda o'zaro qiyosiy baholash imkonini beradi. Olinadigan natijalar ushbu materiallarning fundamental xossalarini chuqurroq tushunishga xizmat qilish bilan birga, yuqori samaradorlikka ega, ekologik xavfsiz va barqaror yangi avlod optoelektronik hamda fotovoltaik qurilmalar uchun istiqbolli materiallarni ilmiy asosda tanlash va optimallashtirishga zamin yaratadi.

Foydalanilgan adabiyotlar

- [1]. Krimi M., Akermi M., Hassani R., Ben Rhaïem A. Optical and conduction mechanism study of lead-free CsMnCl_3 perovskite // Solid State Sciences.- 2024. - Vol. 155. - Art. 107646. - DOI: 10.1016/j.solidstatesciences.2024.107646.
- [2]. Sabir S., Ahmad S., Wattoo A. G. Unveiling role of exchange-correlation functions in investigating physical properties of CsMnCl_3 perovskite for optoelectronic applications // Materials Science in Semiconductor Processing. - 2025. - Vol. 187. - Art. 109138. - DOI: 10.1016/j.mssp.2024.109138.
- [3]. Ricciarelli D., Mosconi E., Merabet B., Bizzarri O., De Angelis F. Electronic properties and carrier trapping in Bi and Mn co-doped CsPbCl_3 perovskite // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2020. - Vol. 11, No. 14. - P. 5482-5489. - DOI: 10.1021/acs.jpclett.0c01567.
- [4]. Paul D. K., Hossain A. K. M. A. A comprehensive DFT + U investigation of electrical, optical, and structural properties of doped CsSnCl_3 perovskite: Unveiling optoelectronic potential // Computational Materials Science. - 2024. - Vol. 231. - Art. 112585. - DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112585.
- [5]. Paul D. K., Zulkarnain S., Somayia [et al.]. An integrated DFT + U and device simulation design of doped CsGeCl_3 for high efficiency flexible solar absorbers // Scientific Reports. - 2026. - Vol. 16. - Art. 20824. - DOI: 10.1038/s41598-026-46832-z.
- [6]. Zhou J., Rong X., Zhang P., Molokeyev M. S. [et al.]. Manipulation of $\text{Bi}^{3+}/\text{In}^{3+}$ transmutation and Mn^{2+} -doping effect on the structure and optical properties of double perovskite $\text{Cs}_2\text{NaBi}_{1-x}\text{In}_x\text{Cl}_6$ // Advanced Optical Materials. - 2019. - Vol. 7, No. 8. - Art. 1801435. – DOI: 10.1002/adom.201801435.
- [7]. Sharma R., Dey A., Dar S. A., Srivastava V. A DFT investigation of CsMgX_3 ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$) halide perovskites: Electronic, thermoelectric and optical properties // Computational and Theoretical Chemistry. - 2021. - Vol. 1204. - Art. 113415. - DOI: 10.1016/j.comptc.2021.113415.