

# 金属卤素钙钛矿 $\text{CsPbBr}_3$ 的电声耦合输运特性研究

杨帆, 周贤中

(广东工业大学 集成电路学院, 广州 510006)

**摘要:** 金属卤素钙钛矿  $\text{CsPbBr}_3$  在发光方面 (Light emitter) 的优良表现吸引了许多人把它作为下一代发光、显示与量子信息的可选材料,但其关键的漂移迁移率会受到声子限制. 本文将以第一性原理计算得到  $\text{CsPbBr}_3$  的包括极性光学声子 (Polar optical phonon) 在内的电声耦合特性,然后使用线性玻尔兹曼方程给出在电场下的解,从而得出漂移迁移率. 在论文详述中会给出  $\text{CsPbBr}_3$  的各向异性载流子输运特性的研究,为金属卤素钙钛矿的应用提供一些必要信息.

**关键词:** 第一性原理计算; 电子-声子耦合; 漂移迁移率

中图分类号: O64

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.026006

## Study on the electrophonic coupling and transport properties of metal halide perovskite $\text{CsPbBr}_3$

YANG Fan, ZHOU Xian-Zhong

(College of Integrated Circuits, Guangdong University of Technology, Gangzhou 510006, China)

**Abstract:** The excellent performance of metal halide perovskite  $\text{CsPbBr}_3$  as a light emitter has attracted many researchers to consider it as a potential material for next-generation lighting, displays, and quantum information applications. However, its crucial drift mobility is limited by phonon scattering. In this paper, we use first-principles calculations to obtain the electronic-phonon coupling properties of  $\text{CsPbBr}_3$ , including polar optical phonons, and then use the linear Boltzmann equation to obtain the drift mobility under an electric field. This paper also presents a detailed study of the anisotropic charge carrier transport properties of  $\text{CsPbBr}_3$ , providing essential information for the application of metal halide perovskites.

**Key words:** First-principles calculation; Electronic-phonon coupling; Drift mobility

## 1 引言

金属卤素钙钛矿  $\text{CsPbBr}_3$  一直被视为光伏电池备选材料之一<sup>[1-3]</sup>. 相比有机-无机杂化钙钛矿,  $\text{CsPbBr}_3$  的稳定性更高, 对温度、湿度等环境参数的敏感程度更小, 因此在光电设备领域具有更广泛的应用前景.

在半导体器件中, 迁移率是最重要的输运性质, 它决定了器件的性能表现. 以往的第一性原理计算结果表明, 金属卤素钙钛矿的电子有效质

量较小, 因此具有更大的电子迁移率<sup>[4]</sup>. 然而据 He 等人的分析, 铅卤化物钙钛矿 (Lead Halide Perovskite, LHP) 的载流子迁移率比传统半导体材料 (如 GaAs) 低了好几个数量级<sup>[5]</sup>. 这是由于在极性半导体中, 纵向光学声子与载流子之间的长程相互作用会导致 Fröhlich 极化子的产生<sup>[6]</sup>, 这种大型极化子会显著减少铅卤化物钙钛矿的载流子迁移率<sup>[7]</sup>. 为了提高器件的性能表现, 有必要进一步研究限制材料迁移率的电子-声子耦合.

尽管近年来学术界对  $\text{CsPbBr}_3$  的兴趣越来越

收稿日期: 2023-07-03

基金项目: 国家自然科学基金(61704032)

作者简介: 杨帆(1998—), 男, 研究生, 主要从事微电子器件的研究. E-mail: 2112103111@mail2.gdut.edu.cn

通信作者: 周贤中. E-mail: zhouxz@gdut.edu.cn

浓厚,但对其了解仍然相对匮乏,尤其是对其载流子迁移率的认识仍不够充分.例如,各种文献中 CsPbBr<sub>3</sub>载流子迁移率的大小仍然散布在很大的范围内,研究 CsPbBr<sub>3</sub>的载流子迁移率也采用了多种理论方法.在这些文献中,最常使用的迁移率数据不外乎霍尔迁移率与漂移迁移率.虽然使用实验方法测定霍尔迁移率比测定漂移迁移率简单,但是测定霍尔迁移率需要外加磁场,这可能会改变迁移率的大小;而到目前为止,仍然很少有对 CsPbBr<sub>3</sub>漂移迁移率的研究.另一方面,当 CsPbBr<sub>3</sub>温度超过 361 K 时,它会从正交相转变为四方相,约在 403 K 时又会从四方相转变为立方相<sup>[8]</sup>.与各向同性的立方相不同,正交相 CsPbBr<sub>3</sub>具有各向异性的载流子输运特性,这又增加了迁移率的研究难度.因此,本研究基于第一性原理计算方法计算 CsPbBr<sub>3</sub>的玻尔兹曼输运方程,试图获得不同温度、不同载流子浓度下的漂移迁移率.

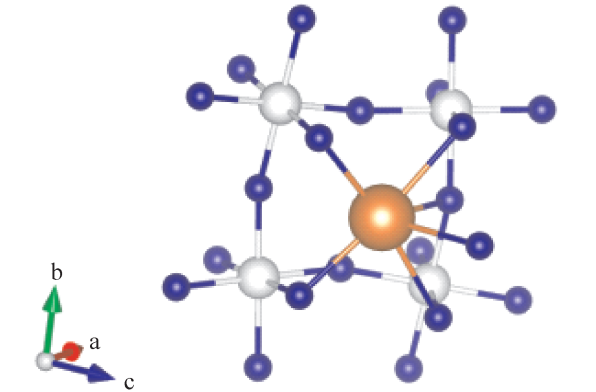


图1 CsPbBr<sub>3</sub>的正交相优化结果

Fig. 1 Orthogonal phase optimization results of CsPbBr<sub>3</sub>

2 电子-声子耦合

2.1 CsPbBr<sub>3</sub>材料结构

CsPbBr<sub>3</sub>晶体在正交晶系中的晶体结构如图1所示,图中结构是通过三维可视化程序 VESTA 绘制的<sup>[9]</sup>.本次晶胞计算结果显示其晶格常数为  $a = 7.55 \text{ \AA}$ 、 $b = 8.38 \text{ \AA}$  和  $c = 11.50 \text{ \AA}$ ,与其他人的计算结果相符<sup>[10]</sup>.相较于实验测定得到的晶格常数,计算结果的误差分别为  $a$ 、 $b$  和  $c$  的 8.7%、1.4% 和 2.3%<sup>[11]</sup>.需要注意的是,局域密度近似 (Local-density approximation, LDA) 方法计算得到的晶格常数通常比实验值略小<sup>[12]</sup>.

2.2 CsPbBr<sub>3</sub>中的电子-声子耦合

使用第一性原理计算声子限制迁移率的关键

在于电声耦合矩阵  $g_{nmv}(k,q)$ , 可以表示为<sup>[13]</sup>:

$$g_{nmv}(k,q) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{qv}}} \sum_{ls\alpha} \frac{e_{qv}}{\sqrt{M_s}} \cdot \langle \psi_{mk+q} | \partial_{qs\alpha} V | \psi_{nk} \rangle \tag{1}$$

其中  $k$  是电子波矢,  $q$  是声子波矢,  $n$  或  $m$  表示相应的带指数,  $v$  表示相应的声子模式指数,  $e_{qv}$  是对应于声子能量  $\hbar\omega_{qv}$  的本征矢量,  $\partial_{qs\alpha} V$  是由于原子  $s$  在第 1 个晶胞中沿  $a$  方向的晶格位移而引起的势能变化,  $\psi_{nk}$  是波函数.一旦得到电子-声子耦合矩阵,被声子限制的变化率  $W_{nk,mk+q}^{qv}$  可以被表示为如下计算过程<sup>[14]</sup>:

$$W_{nk,mk+q}^{qv} = \frac{2\pi}{\hbar} |g_{nmv}(k,q)|^2 \times [ (n_{qv}^0 + f_{mk+q}^0) \delta(\epsilon_{nk} + \hbar\omega_{qv} - \epsilon_{mk+q}) + (1 + n_{qv}^0 - f_{mk+q}^0) \delta(\epsilon_{nk} - \hbar\omega_{qv} - \epsilon_{mk+q}) ] \tag{2}$$

其中  $\epsilon_{nk}$  是由密度泛函理论 (Density functional theory) 计算得到的电子能量的本征值,  $f^0$  是费米-狄拉克分布函数,  $n^0$  是玻色-爱因斯坦分布函数.在极性半导体中,非零波恩效应电荷产生动态偶极子.长程偶极子-偶极子 (dipole-dipole) 相互作用导致了声子在  $q \rightarrow 0$  时发生纵波-横波分裂.由于在  $q \rightarrow 0$  时的长程部分所具有的奇点,公式 (2) 的积分应分为两部分,长程部分  $g_{mnv}^L(k,q)$  和短程部分  $g_{mnv}^S(k,q)$ .长程电子-声子耦合矩阵元素将引入偶极子场一同计算得到<sup>[15]</sup>:

$$g_{mnv}^L(k,q) = i \frac{4\pi}{\Omega} \frac{e^2}{4\pi} \sum_{\kappa} \left( \frac{\hbar}{2N M_{\kappa} \omega_{qv}} \right)^{(1/2)} \times \sum_{G \neq -q} \frac{(q+G) \cdot Z_{\kappa}^* \cdot e_{\kappa v}(q)}{(q+G) \cdot \epsilon^{\infty} \cdot (q+G)} \times \langle \psi_{mk+q} | e^{i(q+G) \cdot r} | \psi_{nk} \rangle \tag{3}$$

除开长程部分的余下部分为短程部分  $g_{mnv}^S(k,q)$ ,可由文献 [16] 使用的计算方法得到:

$$|g_{mnv}^S(k,q)|^2 = |g_{mnv}(k,q)|^2 - |g_{mnv}^L(k,q)|^2 \tag{4}$$

长程部分将使用蒙特卡洛积分,在重要的边缘  $\Gamma-q$  点处使用柯西分布采样.另一方面,余下部分 (即短程部分) 将使用蒙特卡洛积分与多均匀随机网格在  $q \rightarrow 0$  处计算.

3 玻尔兹曼输运方程

3.1 线性玻尔兹曼输运方程

在稳态处,带有较小电场  $E$  与磁场  $B$  的线性玻尔兹曼输运方程 (Boltzmann transport equation,

BTE) 可写为<sup>[17]</sup>:

$$-e \frac{\partial f_{nk}^0}{\partial \epsilon_{nk}} \mathbf{v}_{nk} \cdot \mathbf{E} + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v}_{nk} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_k f_{nk} = \frac{1}{k_B T N_q} \sum_{mqv} f_{nk}^0 (1 - f_{nk}) W_{nk, mk+q}^{qv} (e\mathbf{E} \cdot \mathbf{F}_{nk} - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{F}_{mk+q}) \quad (5)$$

此处,  $e$  是元电荷的电荷量,  $\hbar$  是约化普朗克常数,  $\mathbf{v}_{nk}$  是频带速度,  $N_q$  是  $q$  点声子散射的总数量,  $f_{nk}$  是电子能量分布函数, 而  $W_{nk, mk+q}^{qv}$  是声子限制的输运概率, 它衡量了电子因散射从初态  $nk$  吸收能量或发射声子  $q$  到终态  $mk + q$  的概率.

如果将  $f_{nk}$  写成与分布函数展开相关的小扰动:

$$f_{nk} = f_{nk}^0 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{F}_{nk} \frac{\partial f_{nk}^0}{\partial \epsilon_{nk}} + O(E^2) \quad (6)$$

此处  $\mathbf{F}_{nk}$  表示表征电子分布平衡的一阶偏差.

本文忽略高阶分布函数项. 在只考虑首项的情况下, 线性玻尔兹曼输运函数转化为:

$$\mathbf{v}_{nk} + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v}_{nk} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_k \mathbf{F}_{nk} = \frac{1}{N_q} \sum_{mqv} W_{nk, mk+q}^{qv} (\mathbf{F}_{nk} - \mathbf{F}_{mk+q}) \quad (7)$$

文献 [18] 给出了采用迭代时间近似且考虑磁场影响的线性玻尔兹曼方程:

$$\mathbf{F}_{nk}^{i+1} = \tau_{nk} \mathbf{v}_{nk} + \frac{\tau_{nk}}{N_q} \sum_{mqv} W_{nk, mk+q}^{qv} \mathbf{F}_{mk+q}^i + \tau_{nk} \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v}_{nk} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_k \mathbf{F}_{nk}^i \quad (8)$$

弛豫时间  $\tau_{nk}$  由下式给出:

$$\tau_{nk}^{-1} = \frac{1}{N_q} \sum_{mqv} W_{nk, mk+q}^{qv} \quad (9)$$

此处  $x = \epsilon / (k_B T)$ ,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $T$  为温度.

此外, 能量平均散射率定义为<sup>[19]</sup>:

$$\langle \tau^{-1} \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau^{-1}(x k_B T) x^{3/2} \exp(-x) dx}{\int_0^\infty x^{3/2} \exp(-x) dx} \quad (10)$$

总散射率分布函数定义如下:

$$\tau^{-1}(\epsilon) = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \sum_n \int \delta(\epsilon - \epsilon_{nk}) \tau_{nk}^{-1} d^3k \quad (11)$$

能量平均弛豫时间的计算相当于经典电子气体的形式. 在弛豫时间近似法(Relaxation time approximation, RTA)下, 公式(7)的右边可以忽略不计. 然后, BTE 可以被表示为:

$$\mathbf{F}_{nk}^{i+1} = \tau_{nk} \mathbf{v}_{nk} + \tau_{nk} \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v}_{nk} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_k \mathbf{F}_{nk}^i \quad (12)$$

### 3.2 零磁场线性玻尔兹曼输运方程

按 3.1 节所述进一步地, 如果磁场  $\mathbf{B}$  为 0, 那么弛豫时间近似下的玻尔兹曼输运方程可以直接表示为:

$$\mathbf{F}_{nk} = \tau_{nk} \mathbf{v}_{nk} \quad (13)$$

此外, RTA 下的 BTE 解决方案将直接作为 ITA 下的 BTE 的初始估计来解决. 然后对公式(8)的右侧进行评估, 以更新  $\mathbf{F}_{nk}$  的值. 这个过程将反复进行几次, 直到  $\mathbf{F}_{nk}$  收敛, 并得到 ITA 下的 BTE 的解.

## 4 计算过程

### 4.1 CsPbBr<sub>3</sub> 的第一性原理计算

基态电子结构是通过 QUANTUM ESPRESSO (QE) 软件包在包括自旋-轨道耦合在内的局域密度近似范围内计算的<sup>[20]</sup>. 优化的范数守恒范德瓦尔斯赝势 (ONCVSP25) 用于描述核价相互作用, 由 PseudoDojo 软件包生成<sup>[21]</sup>. 平面波自洽场计算在 100 Ry 的平面波截止和  $6 \times 6$  布里渊区网格下收敛. 声子计算是在 QE 中的 phonon 封装的  $2 \times 2 \times 2$  布里渊区网格的密度泛函微扰理论中进行的<sup>[22]</sup>.  $k$  点和  $q$  点标签的定义是由 SeeK 路径工具定义的<sup>[23]</sup>. 电子准粒子(QP)能量是使用 YAMBO 代码通过 GW 方法获得的<sup>[24]</sup>.

在 GW 计算之后, 价带和导带的能带结构细节通过使用 Wannier90 的最大局域 Wannier 函数进一步插值<sup>[25]</sup>. 电子-声子耦合通过 EPW 软件包进一步计算<sup>[19]</sup>. 电子-声子自能的收敛需要在布里渊区中达到一百万个随机声子波矢  $q$  点. CsPbBr<sub>3</sub> 的正交结构如图 2(a) 所示. 使用 X 射线衍射获得的晶体数据对正交相中的 CsPbBr<sub>3</sub> 进行第一性原理计算<sup>[26]</sup>, 直到力小于  $2.5 \times 10^{-4}$  eV/Å. 晶格常数如表 1 所示. 将计算晶格常数与实验晶格常数进行比较, 相对误差在 10% 以内. 与高度对称的立方相相比, 正交相中原子的位移非常小. 正交相 CsPbBr<sub>3</sub> 的声子 DOS(态密度)如图 2(a) 所示. 计算结果表明, 这两种状态的声子 DOS 具有可比性. 特别是, 本研究确定了正交相声子 DOS 中的三个主峰, 如图 2(a) 所示. CsPbBr<sub>3</sub> 的正交相的声子带结构如图 2(b) 所示. 图中具有负频率的软声子模式.

### 4.2 迁移率计算

在求解 BTE 之后,  $\mu$  的迁移率通过以下公式

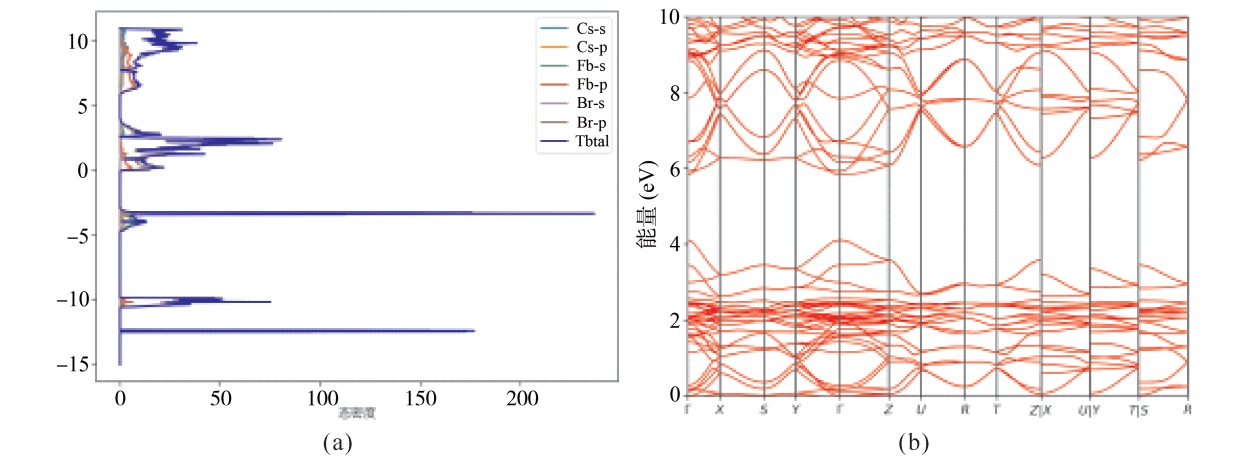


图 2 声子计算结果: (a) CsPbBr<sub>3</sub>态密度; (b) CsPbBr<sub>3</sub>能带图.

Fig. 2 Phonon calculation results: (a) CsPbBr<sub>3</sub> density of states; (b) CsPbBr<sub>3</sub> energy band diagram.

表 1 CsPbBr<sub>3</sub>的晶格常数

Table 1 Lattice constants of CsPbBr<sub>3</sub>

	a( Å )	b( Å )	c( Å )
实验值	8. 26	11. 76	8. 21
计算值	8. 38	11. 50	7. 55

计算:

$$\mu(B) = \frac{2e}{n_c \Omega N_k} \sum_{nk} v_{nkF_{nk}}(B) \left( - \frac{\partial f_{nk}^0}{\partial \epsilon_{nk}} \right) \tag{14}$$

而漂移迁移率 $\mu^d$ 可以简单地由  $B=0$  的条件给出:

$$\mu_{ij}(B) = \mu_{ij}^d + \sum_k T_{ijk} B_k + \text{高阶项} \tag{15}$$

其中  $i, j, k$  是笛卡尔坐标轴. 漂移迁移率 $\mu^d$ 是秩为 2 的张量, 系数  $T_{ijk}$  是具有 27 个元素的秩为 3 的张量.

如果忽略磁场  $B$  中的超线性贡献, 霍尔迁移率可以通过下式获得:

$$\mu_{ijk}^H = T_{ijk} B_k \tag{16}$$

对于本文研究的 CsPbBr<sub>3</sub> 的正交结构, 漂移迁移率的非零独立元素可以通过 Bilbao Crystallographic 服务器获得<sup>[27]</sup>. 漂移迁移率张量如表 2 所示, 其中只有 3 个独立的元素.

表 2 漂移迁移张量分量表

Table 2 Drift migration tensor subscale

$\mu_{ij}$		$j$		
		$x$	$y$	$z$
$i$	$x$	$\mu_{xx}$	0	0
	$y$	0	$\mu_{yy}$	0
	$z$	0	0	$\mu_{zz}$

## 5 计算结果与讨论

### 5.1 载流子有效质量

表 3 和表 4 展示了 CsPbBr<sub>3</sub> 的电子和空穴有效质量张量, 其中  $m_0$  是自由电子质量. 先前的计算表明, 在 (100) 方向, 电子有效质量在  $0.13m_0$  到  $0.22 m_0$  之间, 而空穴有效质量在  $-0.10m_0$  到  $-0.24m_0$  之间<sup>[28-31]</sup>, 这与本研究的结果非常相似. 通过角分辨光电子能谱<sup>[32]</sup>, 实验发现空穴有效质量约为  $0.26m_0$ , 这也与本研究的计算结果一致. 此外, 研究还发现有效质量, 特别是电子有效质量具有强烈的各向异性, 这种各向异性有效质量在以前的报道中已经被提到过<sup>[30]</sup>.

在室温下, 假定 CsPbBr<sub>3</sub> 为正交相. 通过围绕铯离子的 PbBr<sub>6</sub> 八面体旋转, 它偏离了理想的立方钙钛矿结构<sup>[5, 33]</sup>. 与未扭曲的立方晶格结构相比, 计算表明 PbBr<sub>5</sub> 八面体的倾斜角度分别为  $29^\circ$ 、 $29^\circ$  和  $23^\circ$ . 这种大的倾斜角度会严重影响正交相中 CsPbBr<sub>3</sub> 的能带结构. 由于最低导带和最高价带是由 Pb - p 和 Br - p 轨道决定的, 因此 PbBr<sub>6</sub> 八面体的各向异性扭曲可能会改变电子和空穴输运特性的各向异性.

表 3 电子有效质量张量

Table 3 Electron effective mass tensor subscale

$\mu_{ij}$		$j$		
		$x$	$y$	$z$
$i$	$x$	0. 10	0	0
	$y$	0	0. 28	0
	$z$	0	0	2. 14

表 4 穴有效质量张量空  
Table 4 Hole effective mass tensor subscale

$\mu_{ij}$		$j$		
		$x$	$y$	$z$
$i$	$x$	-0.11	0	0
	$y$	0	-0.22	0
	$z$	0	0	-0.31

5.2 漂移迁移率

在大多数半导体器件中，载流子迁移率对于器件性能起着核心作用，如钙钛矿薄膜场效应晶体管<sup>[34, 35]</sup>。本文采用如前所述的方法计算了 CsPbBr<sub>3</sub> 的漂移迁移率随温度的变化。通过对空间群的对称性进行分析，研究发现 CsPbBr<sub>3</sub> 的空穴和电子各存在三个独立的漂移迁移率。图 3 展示了计算得到的 CsPbBr<sub>3</sub> 空穴和电子的漂移迁移率。在图 3(a) 展示了温度范围为 100K 到 400 K 时，空穴漂移迁移率随温度变化的曲线，图 3(b) 则是电子在相同温度范围内的漂移迁移率变化。三个独立的漂移迁移率  $\mu_{xx}$ 、 $\mu_{yy}$  和  $\mu_{zz}$ ，在图 3(a) 和图 3(b) 中分别用不同颜色的三条线表示。在计算过程中，将 CsPbBr<sub>3</sub> 的空穴密度设定为室温下的  $6.4 \times 10^{-16} \text{ cm}^{-3}$ 。

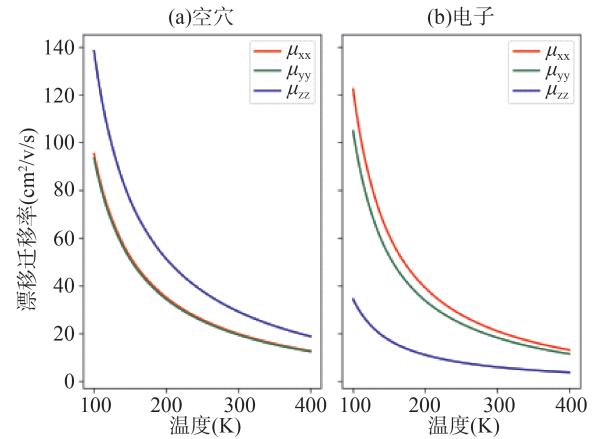


图 3 漂移迁移率计算结果：(a) 空穴漂移迁移率计算结果。(b) 电子漂移迁移率计算结果。  
Fig. 3 Drift mobility calculation results: (a) Calculation results of hole drift mobility. (b) Calculation results of electron drift mobility.

6 结 论

本研究通过第一性原理计算的方式，获得了 CsPbBr<sub>3</sub> 在室温下电子和空穴的有效质量张量以及漂移迁移率的详细信息。研究发现，随着温度的升高和载流子浓度的增加，CsPbBr<sub>3</sub> 的电子和空穴

有效质量将会显著降低，而漂移迁移率则会随之增加。这一结果表明了 CsPbBr<sub>3</sub> 在室温下可以展现出较高的电子和空穴的输运性能，并且证实了 CsPbBr<sub>3</sub> 作为有机-无机杂化钙钛矿的替代材料具有较好的应用潜力。此外，研究发现 CsPbBr<sub>3</sub> 的正交相和四方相在载流子输运方面存在着明显的各向异性，这一结论对于进一步的材料设计和器件制备有着重要的指导意义，为深入理解 CsPbBr<sub>3</sub> 的输运性质提供了重要的理论基础，并为其在光电设备方面的应用开辟了更加广阔的前景。

参考文献：

[1] Yuan H, Zhao Y, Duan J, *et al.* All - inorganic CsPbBr<sub>3</sub> perovskite solar cell with 10.26% efficiency by spectra engineering [J]. *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6: 24324.

[2] Gao Y, Wu Y, Lu H, *et al.* CsPbBr<sub>3</sub> perovskite nanoparticles as additive for environmentally stable perovskite solar cells with 20.46% efficiency[J]. *Nano Energy*, 2019, 59: 517.

[3] Chang X, Li W, Zhu L, *et al.* Carbon - based CsPbBr<sub>3</sub> perovskite solar cells; all - ambient processes and high thermal stability [J]. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2016, 8: 33649.

[4] Chen X, Han D, Su Y, *et al.* Structural and electronic properties of inorganic mixed halide perovskites [J]. *Phys. Stat. Soli.*, 2018, 12: 1800193.

[5] He Y, Matei L, Jung H J, *et al.* High spectral resolution of gamma - rays at room temperature by perovskite CsPbBr<sub>3</sub> single crystals [J]. *Nature Commun.*, 2018, 9: 1609.

[6] Fröhlich H, Pelzer H, Zienau X X. Properties of slow electrons in polar materials [J]. *Philoso. Mag.*, 1950, 41: 221.

[7] Zhu X Y, Podzorov V. Charge carriers in hybrid organic - inorganic lead halide perovskites might be protected as large polarons [J]. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2015, 6: 4758.

[8] Hirotsu S, Harada J, Iizumi M, *et al.* Structural phase transitions in CsPbBr<sub>3</sub> [J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1974, 37: 1393.

[9] Momma K, Izumi F. VESTA 3 for three - dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data [J]. *J. Appl. Crystal.*, 2011, 44: 1272.

[10] Tomanová K, Cuba V, Brik M G, *et al.* On the structure, synthesis, and characterization of ultrafast blue - emitting CsPbBr<sub>3</sub> nanoplatelets [J]. *APL Mater.*,

- 2019, 7: 011104.
- [11] Chen M, Yuan Y, Liu Y, *et al.* High – quality all – inorganic CsPbBr<sub>3</sub> single crystals prepared by a facile one – step solution growth method [J]. *RSC Adv.*, 2022, 12: 14838.
- [12] Zhang G X, Reilly A M, Tkatchenko A, *et al.* Performance of various density – functional approximations for cohesive properties of 64 bulk solids [J]. *New J. Phys.*, 2018, 20: 063020.
- [13] Giustino F. Erratum: Electron – phonon interactions from first principles [Rev. Mod. Phys. 89, 15003 (2017)] [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2019, 91: 019901.
- [14] Zhou J J, Park J, Lu I T, *et al.* Perturbo: A software package for *ab initio* electron – phonon interactions, charge transport and ultrafast dynamics [J]. *Comp. Phys. Commun.*, 2021, 264: 107970.
- [15] Verdi C, Giustino F. Fröhlich electron – phonon vertex from first principles [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 115: 176401.
- [16] Zhou J J, Bernardi M. *Ab initio* electron mobility and polar phonon scattering in GaAs [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94: 201201.
- [17] Desai D C, Zviahynski B, Zhou J J, *et al.* Magneto-transport in semiconductors and two – dimensional materials from first principles [J]. *Phys. Rev. B*, 2021, 103(16): L161103.
- [18] Bernardi M. First – principles dynamics of electrons and phonons [J]. *Eur. Phys. J. B*, 2016, 89: 1.
- [19] Poncé S, Macheda F, Margine E R, *et al.* First – principles predictions of Hall and drift mobilities in semiconductors [J]. *Phys. Rev. Res.*, 2021, 3: 043022.
- [20] Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, *et al.* QUANTUM ESPRESSO: a modular and open – source software project for quantum simulations of materials [J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 2009, 21: 395502.
- [21] van Setten M J, Giantomassi M, Bousquet E, *et al.* The PseudoDojo: training and grading a 85 element optimized norm – conserving pseudopotential table [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2018, 226: 39.
- [22] Giannozzi P, Andreussi O, Brumme T, *et al.* Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO [J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 2017, 29: 465901.
- [23] Hinuma Y, Pizzi G, Kumagai Y, *et al.* Band structure diagram paths based on crystallography [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 2017, 128: 140.
- [24] Sangalli D, Ferretti A, Miranda H, *et al.* Many – body perturbation theory calculations using the yambo code [J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 2019, 31: 325902.
- [25] Pizzi G, Vitale V, Arita R, *et al.* Wannier90 as a community code: new features and applications [J]. *J. Phys. : Condens. Matter*, 2020, 32: 165902.
- [26] Wang Y, Yang F, Li X, *et al.* Epitaxial growth of large – scale orthorhombic CsPbBr<sub>3</sub> perovskite thin films with Anisotropic photoresponse property [J]. *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29: 1904913.
- [27] Gallego S V, Etxebarria J, Elcoro L, *et al.* Automatic calculation of symmetry – adapted tensors in magnetic and non – magnetic materials: a new tool of the Bilbao crystallographic server [J]. *Acta Crystall. A*, 2019, 75: 438.
- [28] Tomanová K, Cuba V, Brik M G, *et al.* On the structure, synthesis, and characterization of ultrafast blue – emitting CsPbBr<sub>3</sub> nanoplatelets [J]. *APL Mater.*, 2019, 7: 011104.
- [29] Yettapu G R, Talukdar D, Sarkar S, *et al.* Terahertz conductivity within colloidal CsPbBr<sub>3</sub> perovskite nanocrystals: remarkably high carrier mobilities and large diffusion lengths [J]. *Nano Lett.*, 2016, 16: 4838.
- [30] Ramade J, Andriambariarijaona L M, Steinmetz V, *et al.* Fine structure of excitons and electron – hole exchange energy in polymorphic CsPbBr<sub>3</sub> single nanocrystals [J]. *Nanoscale*, 2018, 10: 6393.
- [31] Han X, Wang X, Feng J, *et al.* Carrier mobility enhancement in (121) – oriented CsPbBr<sub>3</sub> perovskite films induced by the microstructure tailoring of PbBr<sub>2</sub> precursor films [J]. *ACS Appl. Electron. Mater.*, 2020, 3: 373.
- [32] Chen Q, Wang Z, Song Z, *et al.* Effect of thickness on the electronic structure and optical properties of quasi two – dimensional perovskite CsPbBr<sub>3</sub> nanoplatelets [J]. *J. Lumin.*, 2021, 239: 118392.
- [33] Puppini M, Polishchuk S, Colonna N, *et al.* Evidence of large polarons in photoemission band mapping of the perovskite semiconductor CsPbBr<sub>3</sub> [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 206402.
- [34] Yu C J, Ko U H, Hwang S G, *et al.* First – principles study on material properties and stability of inorganic halide perovskite solid solutions CsPb (I<sub>1-x</sub>Br<sub>x</sub>)<sub>3</sub> [J]. *Phys. Rev. Mater.*, 2020, 4: 045402.
- [35] Senanayak S P, Yang B, Thomas T H, *et al.* Understanding charge transport in lead iodide perovskite thin – film field – effect transistors [J]. *Sci. Adv.*, 2017, 3: e1601935.