
大连化物所揭示无铅钙钛矿材料的结构调变与光电性质本质关系

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10311.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院院士、中科院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室研究员李灿，研究员李仁贵等在钙钛矿材料的结构调变与光电性质的研究方面取得新进展，发现全无机非铅卤化物钙钛矿结构内部八面体畸变的消除明显降低了电子-空穴对局域化，增强了光生电荷的分离与传输，表现出优异的光电性质。

金属卤化物钙钛矿由于其优异的光电性质（如光吸收系数高、激子结合能低、载流子迁移率高和扩散长度长等）而受到广泛关注，目前已被应用于各光电领域。然而，为什么具有钙钛矿类结构的材料表现出如此优异的光电性质，以及其独特的结构如何影响光生电荷的分离与传输等关键问题仍不清楚，这限制了进一步发展高效的钙钛矿光电材料体系。

研究团队选用 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$

这一类

典型的无机卤

化物钙钛矿半导体为研究对

象，通过理论计算与实验相结合，发现 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 中 BiBr_6 八面体结构畸变使激发的电子-空穴对强局域在Bi中心，由此产生了激子结合能，阻碍了光生电荷的分离与传输。进一步通过向其结构中引入Ag原子替代部分Bi原子，形成双钙钛矿 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

，Ag占据了原来的空位，消除了八面体的结构畸变，降低了电子-空穴对的强局域化，

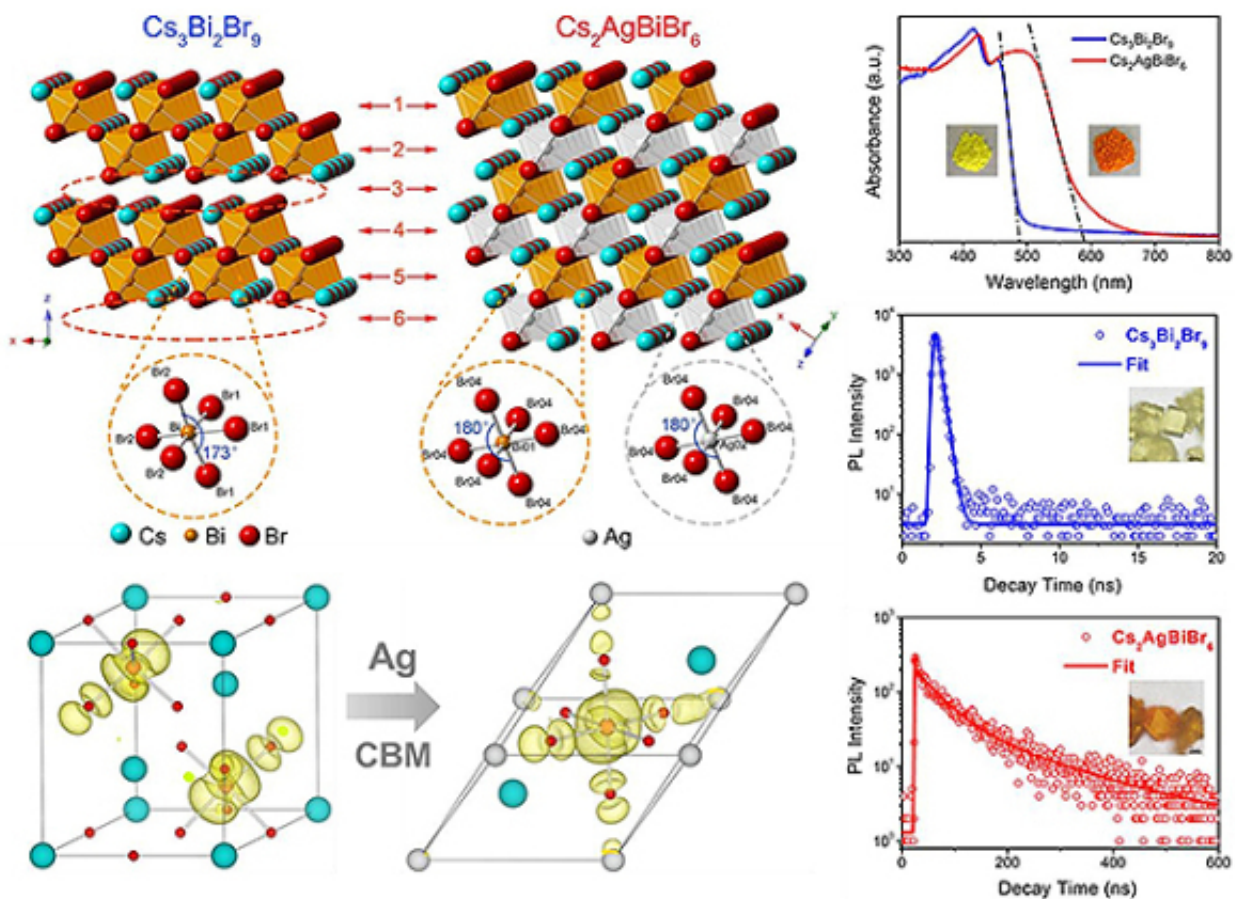
使导带和价带中的电子分布更加分散。因

此，相比于 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ ， $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

的激子结合能更小，载流子有效质量更低，载流子迁移率更高，有效寿命更长，提升了光生电荷的分离和传输性质。该研究团队进一步以可见光下光催化产氢反应作为探针反应，发现钙钛矿微观结构的调变使光催化产氢活性提高了两个数量级以上，进一步验证了钙钛矿结构调变对其光生电荷分离和传输性质的重要影响。该研究工作对于深入理解钙钛矿半导体微观结构与其光电特性的本质关联、理性设计和指导新型钙钛矿材料体系应用于光电领域具有重要意义。

相关研究成果发表在《[先进材料](#)》（Advanced Materials

）上，论文第一作者是博士生石明。研究工作得到国家自然科学基金项目、中科院战略性先导科技专项（A类）“变革性洁净能源关键技术与示范”和兴辽英才计划项目等的支持。



无铅钙钛矿材料的结构调变与光电性质

研究团队单位：大连化学物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发