

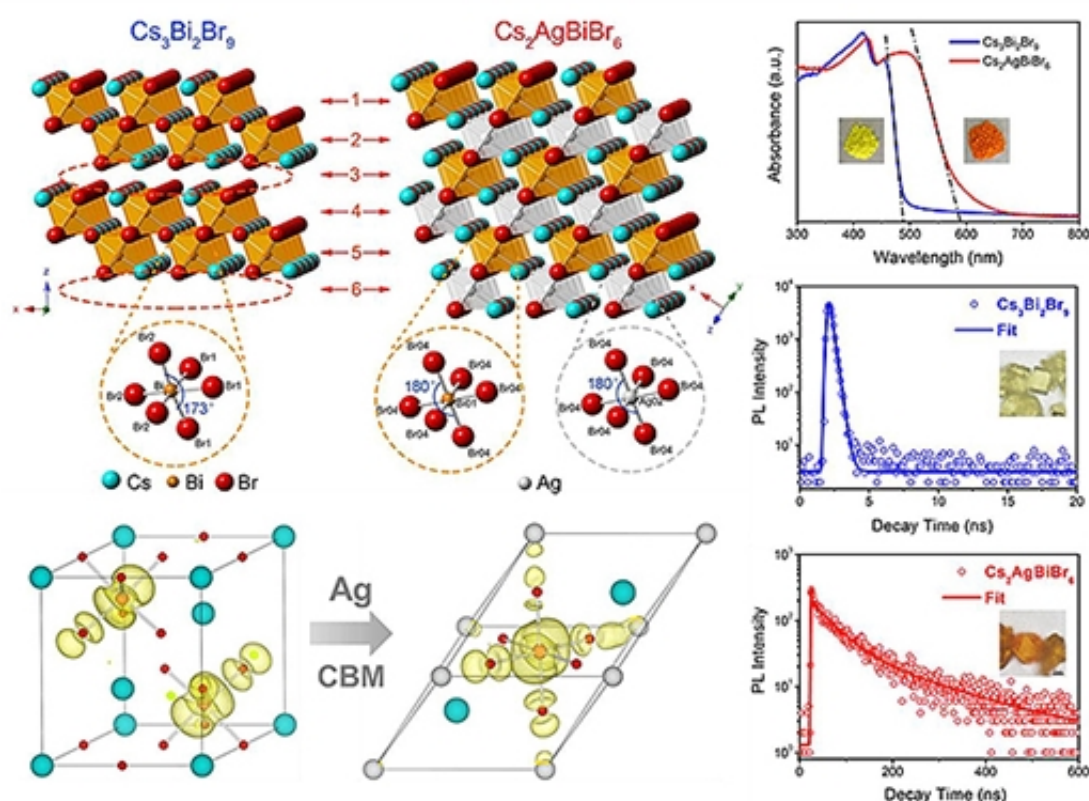
钙钛矿结构调变影响光生电荷分离和传输性质

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/10325.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！

钙钛矿结构调变影响光生电荷分离和传输性质。



近日，中科院大连化学物理研究所李灿院士、李仁贵研究员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，极大地增强了光生电荷的分离与传输，表现出优异的光电性质。相关研究成果发表在《先进材料》上。

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）而受到研究者的广泛关注，目前已被应用于各光电领域。

研究人员选用 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 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 八面体结构畸变使得激发的电子—空穴对强局域在铋（Bi）中

心，由此产生了极大的激子结合能，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银（Ag）原子替代部分铋（Bi）原子，形成双钙钛矿Cs₂AgBiBr₆，银（Ag）占据了原来的空位，消除了八面体的结构畸变，大大降低了电子—空穴对的强局域化，使得导带和价带中的电子分布更加分散。因此，相比于Cs₃Bi₂Br₉，Cs₂AgBiBr₆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，极大地提升了光生电荷的分离和传输性质。

李仁贵介绍：我们团队又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得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。（来源：中国科学报刘万生 石明）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/adma.202002137>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：李灿等 来源：《先进材料》

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](https://www.iikx.com)转发