

---

# 调控晶格畸变可优化卤化物钙钛矿发光性能

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12125.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！**

调控晶格畸变可优化卤化物钙钛矿发光性能。

北京高压科学研究中心吕旭杰课题组与美国西北大学教授Mercouri G Kanatzidis等合作，通过调控晶格畸变实现了卤化物钙钛矿材料最佳发光性能。同时，利用高压调控结合化学方法系统研究了一系列具有独特畸变结构的锗基钙钛矿材料，揭示了卤化物钙钛矿定量构效关系并提出实现最佳发光性能的结构参数。相关成果近期发表于《国家科学评论》。

金属卤化物钙钛矿材料具有独特的结构和光电性质，正在为光电器件带来新的发展契机。而高效钙钛矿材料的毒性和不稳定性问题极大地阻碍了其发展。为获得安全、稳定的高性能钙钛矿光电材料，需要对其结构物性关系有深刻的理解。这就要求有合适的材料体系以及先进的结构物性原位调控和表征手段。

该团队通过优选具有畸变结构的锗基卤化物钙钛矿，利用高压原位表征技术，结合理论计算对其晶格、电子结构与物性的演变规律进行了系统而深入的研究。研究发现，随着压力的升高，MAGeI<sub>3</sub>与FAGeI<sub>3</sub>的荧光强度和发光颜色均显示出极大的可调节性（1GPa内强度提升>20倍，波长调节>180 nm/GPa）。

作者通过引入偏心畸变参数D，定量论述了八面体畸变与发光强度的关系：调控偏心参数至0.2可实现最大发光强度。研究人员进一步将此规律应用于材料设计，通过化学掺杂铯离子调控锗基钙钛矿的晶格畸变，同样实现了发光效率的可控提升。实验结果进一步验证了高压研究发现的定量构效关系。

专家表示，该工作不仅通过高压研究揭示了卤化物钙钛矿材料中重要的定量构效关系，而且直接将高压研究的成果用于新材料设计开发，有望进一步促进高压技术在材料、化学等领域的应用。该课题获得国家自然科学基金等项目的支持。（来源：中国科学报 闫洁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwaa288>

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：吕旭杰等 来源：《国家科学评论》

---

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