
科学家揭示铅锡混合钙钛矿带隙的关键突变机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31260.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！

科学家揭示铅锡混合钙钛矿带隙的关键突变机制。1月8日，南方科技大学教授何祝兵团队联合东方理工大学教授魏苏淮团队，揭示了铅锡混合钙钛矿光学带隙随铅锡比例变化规律中的突变机制，完成了其物理图像的全景拼图，相关研究成果在《科学进展》上发表。

审稿人对该成果评价道：他们完成了一项非常挑战性的工作，将推进具有前景的铅锡混合钙钛矿材料的发展。

铅锡混合钙钛矿因为带隙可调且低至1.2电子伏特，在光伏、红外光电探测器、红外单色光源等领域具有巨大的应用前景。铅锡混合钙钛矿因其具有窄带隙特点，被广泛用于底电池制备钙钛矿叠层光伏电池。尽管其应用前景广阔，人们对铅锡混合钙钛矿的认知还非常有限。

铅锡混合钙钛矿属于典型的合金化半导体，其带隙随钙钛矿合金中铅和锡的比例呈弓形曲线特征，但这一规律缺乏验证，其重要原因在于，铅锡钙钛矿薄膜由于铅钙钛矿和锡钙钛矿结晶速率不平衡，容易出现成分分离的问题，导致无法获得根据铅锡投料比制备出准确铅锡比例的薄膜材料。此外，有实验数据显示，铅锡比例为0.5：0.5的钙钛矿材料光学带隙显著偏离弓形曲线，但这一现象的物理机制尚未得到揭示。

为解决这一难题，研究人员首次成功合成了全化学计量比的铅锡混合钙钛矿纳米单晶材料，并通过冷冻电镜技术，首次成功拍摄到了含锡钙钛矿的原子级晶格像。

基于各种铅锡比例成分的高质量单晶，研究团队测量所得的光学带隙呈现典型的弓形效应，并发现铅锡比例为0.5：0.5的钙钛矿纳米单晶的带隙显著远离这条弓形规律曲线。

通过测量了不同成分纳米单晶的微观晶格应变大小，研究团队发现晶格应变随着成分比例从两端向中间，呈现上升趋势。当铅锡比例0.6：0.4、0.4：0.6时，晶格应变达到极值，铅锡比例为0.5：0.5的晶格应变出现突然下降，这表明晶格中铅锡排列在铅锡比例为0.5：0.5时发生了无序到有序的转变，这与带隙规律形成良好的吻合。

进一步研究发现，铅锡比例为0.5：0.5时，形成焓出现明显的负值，意味着该组分可能形成有序相。同时，他们发现应变能是由于铅锡离子尺寸差异导致的，而铅锡有序排列有利于减小应变，印证了实验测得的应变变化规律。

此外，库伦能的研究表明，有序排列结构的库伦能幅度最大，从而获得形成焓能量上的增益。与之对应，计算合金结构的带隙表明，有序结构的带隙要比无序结构带隙要大，这可能是由于未被

占据的导带和被占据的价带之间的耦合作用增强引起的。

该研究发掘了铅锡混合钙钛矿材料带隙弓形机制的关键拼图，揭示了其晶格存在的无序-有序相结构转变现象与物理学机制，加深了人们对该类合金化材料的构效关系理解，对未来铅锡混合钙钛矿材料设计具有重要的启示作用。基于该研究中合成的纳米晶，研究团队已制备出发光波长930纳米的近红外LED器件，也是目前报道的、波长最长的钙钛矿基LED器件。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：<https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.ads4038>

作者：何祝兵等 来源：《科学进展》

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