
钙钛矿界面动态演化的原位电子显微观测

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38639.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！

钙钛矿界面动态演化的原位电子显微观测。钙钛矿发光二极管在实际运行过程中，埋藏界面内部究竟发生了怎样的结构失稳、离子迁移与化学反应，一直缺乏直接的实验观测。近日，剑桥大学研究团队构建了一种多模态原位电子显微平台，通过结合4D-STEM、EDS和低剂量原子分辨成像，实现了对工作态PeLED纳米尺度退化过程的直接追踪。研究表明，器件退化主要集中在发光层与传输层界面，而非发光层体相本身；同时，研究还揭示了氯离子迁移诱导的铝电极腐蚀和界面富铅相形成等关键失效路径。该工作为理解发光二极管老化机理与稳定性设计提供了新的原子尺度依据。

相关成果Multimodal electron microscopy of halide perovskite interfacial dynamics发表在2026年3月11日的Nature期刊上。通讯作者为英国剑桥大学卡文迪许实验室研究员刘天俊博士和材料系Caterina Ducati教授，第一作者为李欣娟。

钙钛矿发光二极管兼具高效率、低成本和溶液加工等优势，被认为是下一代显示与光电子器件的重要候选。然而，这类器件在持续工作过程中的退化机制十分复杂，尤其是埋藏界面处的结构演化与化学反应，长期缺乏可直接观测的原子尺度证据。为解决这一难题，研究团队构建了一个能够在电偏压条件下实时追踪器件演化的原位观测平台（图1）。研究人员将实际制备的蓝光PeLED器件截面加工为纳米尺度样品，并集成到具有电偏压功能的MEMS芯片上，使器件能够在显微镜中以接近真实工作状态运行。借助这一平台，研究人员首次直接捕捉到器件从初始工作到性能衰退过程中晶格畸变、相变、离子迁移和电极腐蚀等关键过程。

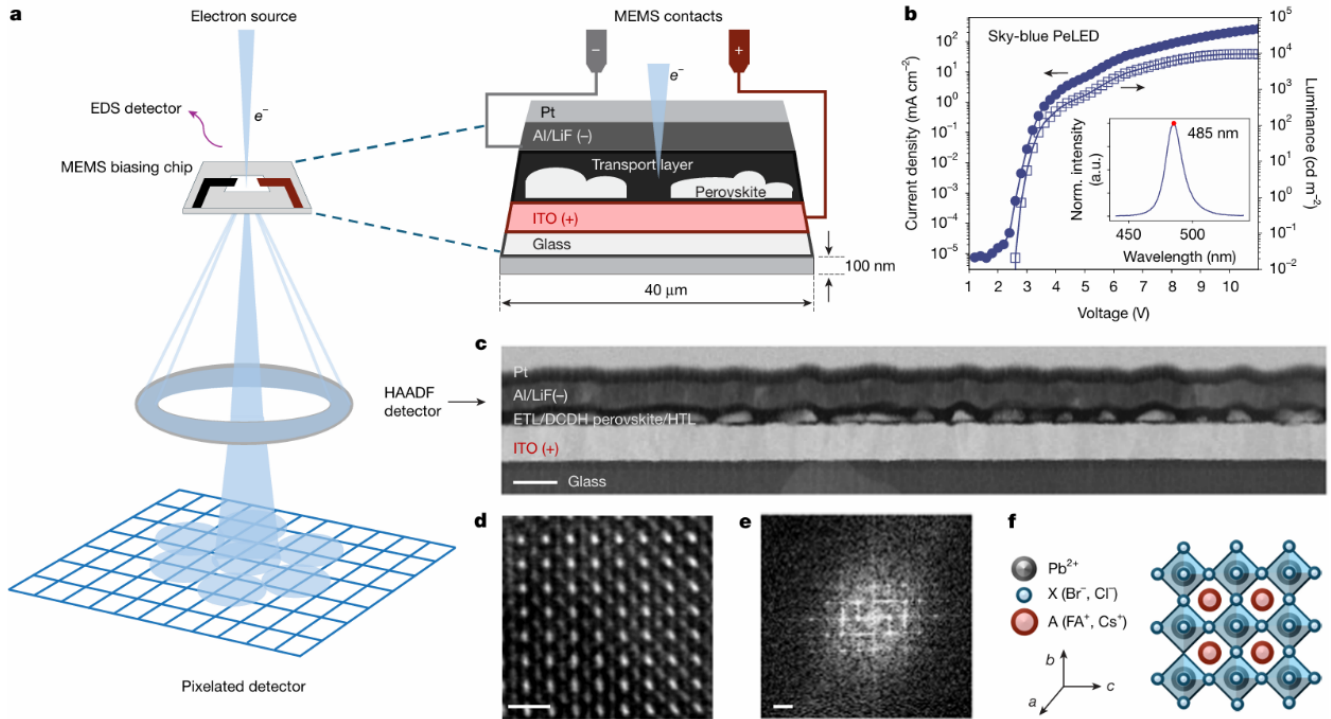


图1：钙钛矿蓝光发光二极管的原位偏压多模态电子显微研究。（图片来源：Nature）

研究发现，在器件初始状态下，钙钛矿发光层中心区域总体保持较完整的正交相晶体结构，而靠近电子传输层和空穴传输层的界面区域则已存在明显的局域应变、晶格错配和富铅区域。进一步地，研究团队利用几何相位分析（GPA）对埋藏界面的局域晶格应变与结构畸变进行了定量表征。结果显示，在钙钛矿发光层与相邻功能层的界面处，晶格已出现显著的应变积累和局域畸变，表明器件在制备完成后，界面区域便已埋下潜在失稳前驱体。

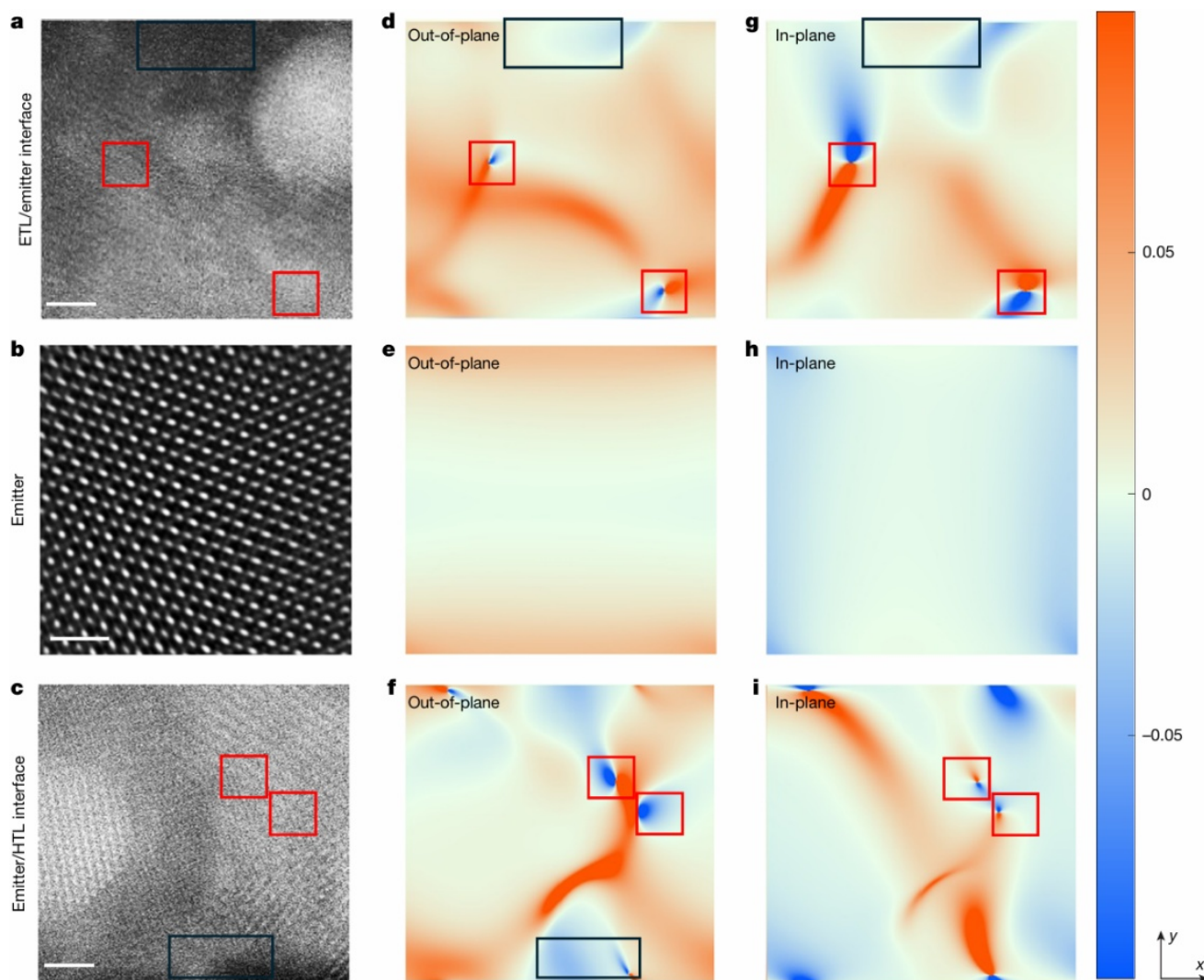


图2：几何相位分析揭示的界面应变与结构畸变。（图片来源：Nature）

在持续电流驱动下，这些界面区域优先发生结构扭曲和化学分解，逐渐形成金属铅、 PbX_2 和 CsPb_2X_5 等富铅次生相，并伴随着晶粒破碎和局域结构塌缩。相比之下，发光层体相的大部分区域在较长时间内仍保持相对完整。这一结果表明，PeLED性能衰退主要源于界面退化所导致的载流子注入受阻和非辐射损失增强，而非发光层体相的整体分解。

除发光层与传输层界面的失稳外，研究还揭示了金属电极的重要退化路径（图3）。实验表明，在偏压作用下，器件中的氯离子会发生迁移，并与铝电极反应，导致部分金属Al转化为绝缘性的 AlCl_3 。该界面腐蚀过程会显著削弱电子注入能力、增加器件电阻，并进一步加剧局域焦耳热和结构失稳，从而形成退化正反馈。

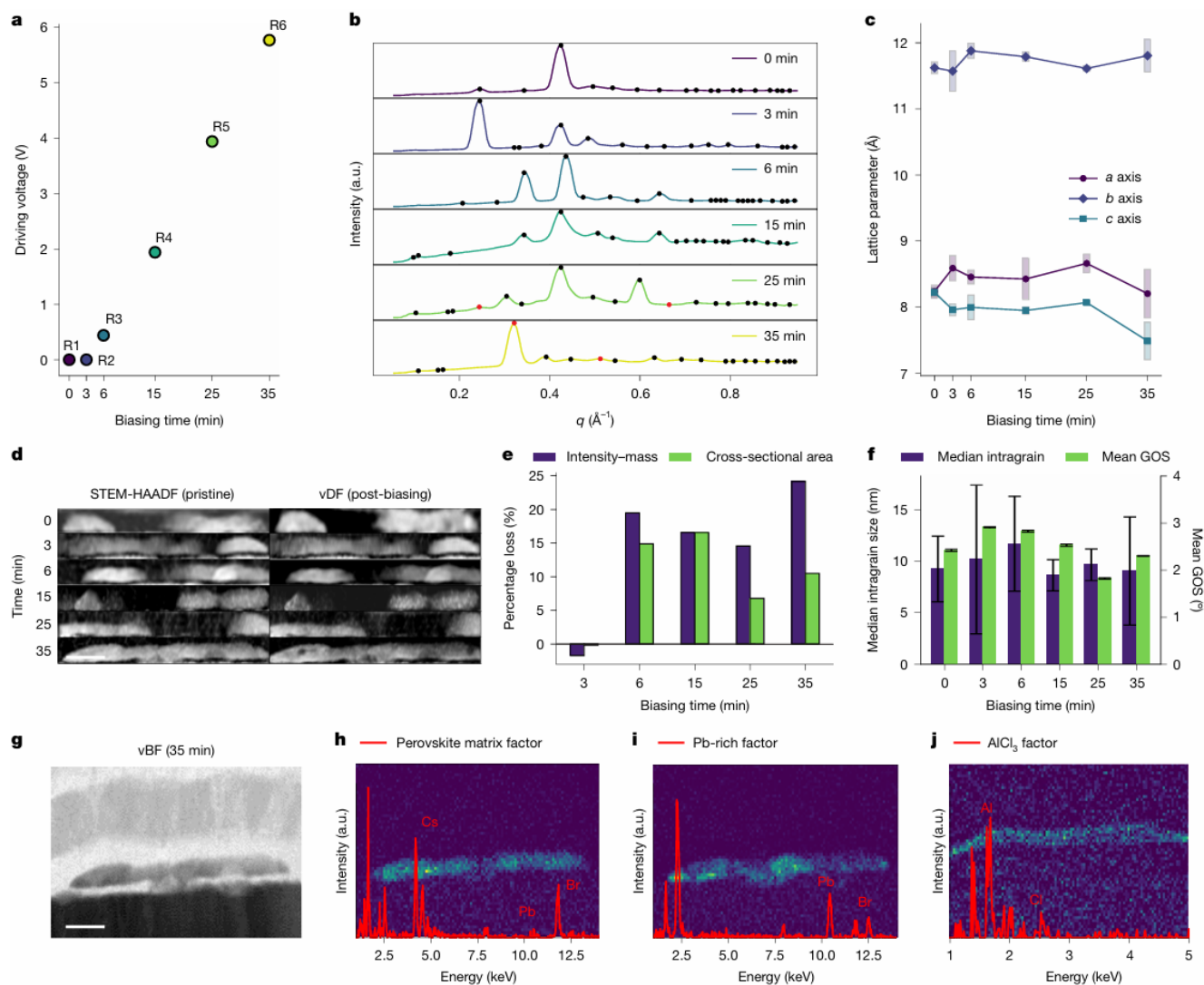


图3：发光二极管运行状态下结构与化学退化的多模态分析。（图片来源：Nature）

综合来看，研究表明埋藏界面的局部应变和成分不均一性会在电场驱动下诱发更强的离子迁移和化学反应，最终触发材料分解和器件失效。换言之，PeLED在工作过程中更像是一个纳米尺度的电化学反应单元，而器件寿命在很大程度上取决于界面是否足够稳定。这项工作的意义不仅在于揭示了蓝光钙钛矿LED的失效源头，更在于建立了一套可推广的原位多模态显微研究范式。

总体而言，该研究首次从纳米到原子尺度系统揭示了钙钛矿LED在实际工作偏压下的界面动态演化过程。所发展的多模态原位表征方法可推广至发光二极管、太阳能电池和光探测器等复杂光电器件，为解析界面反应、应变演化与离子输运提供直接证据。这一成果不仅为高稳定性钙钛矿发光器件的设计奠定了科学基础，也为新一代高性能光电半导体器件的失效分析与可靠性研究提供了新思路。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10238-8>

作者：刘天俊等 来源：《自然》

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