

氟膦酸配体赋能纯蓝光钙钛矿QLED新突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/41312.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！

氟膦酸配体赋能纯蓝光钙钛矿QLED新突破。 导读

卤化物钙钛矿纳米晶是下一代发光二极管的核心候选材料，凭借优异的光电特性在超高清显示、固态照明领域备受关注。然而纯蓝光钙钛矿QLED的发展始终滞后于红、绿光器件，成为制约全钙钛矿三基色显示产业化的关键瓶颈。哈尔滨工业大学陈冠英教授团队联合瑞典乌普萨拉大学Hans Ågren教授团队，提出多功能氟代膦酸配体工程新策略，实现了钙钛矿纳米晶表面缺陷的高效钝化与卤离子的稳定束缚。基于该策略制备的纯蓝光钙钛矿QLED，在效率、亮度和稳定性上实现同步十倍级提升，光谱稳定性优异且发射峰匹配超高清显示标准，为高性能纯蓝光钙钛矿光电器件的研发提供了新路径。相关研究成果以Multifunctional ligand engineering enables high-performance CsPb(Br/Cl)₃ nanocrystals toward efficient and stable pure-blue perovskite LEDs为题发表于《Light: Science Applications》。

研究背景

钙钛矿纳米晶兼具高发光量子产率、可调发射光谱、高颜色纯度和溶液可加工性等优势，成为新型光电器件的研究热点，目前全波段钙钛矿QLED的外量子效率已突破25%。在红、绿、蓝三基色器件中，纯蓝光（460-470 nm）器件的研发却面临诸多难题，溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶虽是制备纯蓝光器件的理想材料，但其晶格易产生卤化物空位，且卤离子在器件工作的偏压和热作用下极易发生迁移。

这一问题会直接导致材料非辐射复合加剧、发光效率降低，还会引发器件光谱偏移，严重影响色纯度和工作稳定性。传统的改性策略难以同时实现缺陷钝化和离子稳定，如何通过精准的分子设计解决这两大核心问题，成为推动纯蓝光钙钛矿QLED发展的关键。

创新研究

团队针对纯蓝光钙钛矿QLED的核心痛点，选取十七氟癸基膦酸（HFPA）作为多功能钝化配体，将其引入溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶的合成过程，通过配体与纳米晶表面的多重化学相互作用，实现了材料光电性能的全方位优化，同时制备出高性能纯蓝光钙钛矿QLED，核心创新点如下：

多重作用实现全方位表面钝化

HFPA配体通过三种方式与钙钛矿纳米晶表面精准结合，形成立体钝化网络：膦酰基与纳米晶表

面未配位的铅离子形成稳定配位键，有效消除阳离子缺陷；羟基与相邻卤离子形成氢键，牢牢固定卤离子并抑制空位形成；氟原子与卤化物八面体形成离子键，增强晶格结构的稳定性，从根源上减少缺陷产生。

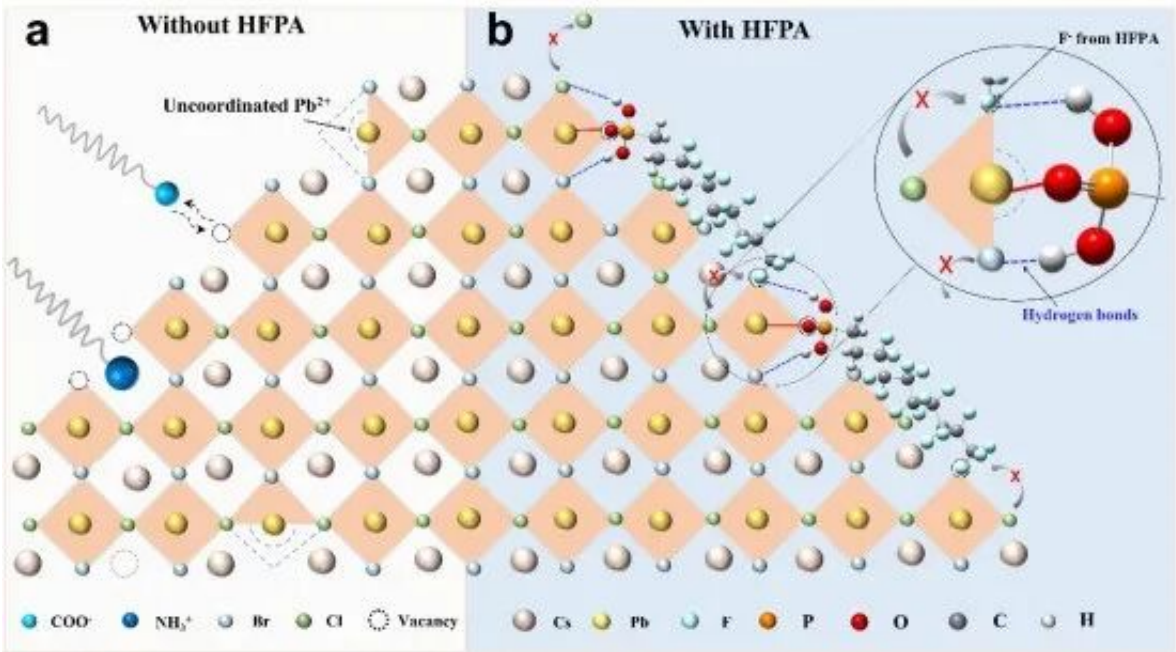


图 1 氟代膦酸对溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶的表面钝化机制

a. 未经过氟代膦酸钝化的溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶表面示意图，存在大量未配位铅离子与卤化物空位；b. 氟代膦酸分子通过膦酰基与铅离子配位结合，经羟基与卤离子形成氢键，并依靠氟原子稳定卤化物八面体结构，实现对纳米晶表面缺陷的高效钝化

图 2 氟代膦酸与溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶的相互作用

a. 原始纳米晶与氟代膦酸改性纳米晶的红外光谱图，可见改性纳米晶表面出现氟代膦酸官能团的特征振动峰；b. 纯氟代膦酸及氟代膦酸与溴化铅混合体系的¹⁹F核磁共振谱，反映出氟代膦酸与铅离子间的配位相互作用；c. 纯氟代膦酸及氟代膦酸与溴化铅混合体系的¹H核磁共振谱，证实氟代膦酸与卤离子间形成氢键；d. 原始纳米晶与氟代膦酸改性纳米晶的高分辨C 1s光电子能谱，证实改性纳米晶表面含氟基团的存在；e. 两种样品的高分辨P 2p光电子能谱，验证氟代膦酸成功负载于纳米晶表面；f. 原始纳米晶与氟代膦酸改性纳米晶的高分辨Pb 4f光电子能谱，可见氟代膦酸钝化后铅离子的化学环境发生改变。

材料光电特性实现质的提升

经HFPA修饰后的钙钛矿纳米晶，非辐射复合被显著抑制，光致发光量子产率得到大幅提升，激子结合能提高，陷阱密度显著降低。同时纳米晶的环境稳定性大幅增强，在常温常压、高温和紫外辐照条件下均能保持优异的光电性能，热分解温度显著提升，解决了钙钛矿材料对环境敏感的固有问题。

图 3 氟代膦酸对溴氯混合卤化铯铅钙钛矿纳米晶的缺陷钝化效果

a. 原始纳米晶与氟代膦酸改性纳米晶的归一化吸收光谱和光致发光光谱，附对应光致发光量子产率数值；b. 两种样品的瞬态光致发光衰减曲线，附辐射复合速率数据；c. 空间电荷限制电流测试的J-V曲线，呈现用于缺陷密度评估的陷阱填充极限电压；d. 原始纳米晶薄膜在78~300 K下的变温光致发光光谱等高图；e. 原始纳米晶的变温光致发光积分强度及用于激子结合能计算的拟合曲线；f. 原始纳米晶的光致发光光谱半高宽随温度的变化关系；g. 氟代膦酸改性纳米晶薄膜在78~300 K下的变温光致发光光谱等高图；h. 氟代膦酸改性纳米晶的变温光致发光积分强度及用于激子结合能计算的拟合曲线；i. 氟代膦酸改性纳米晶的光致发光光谱半高宽随温度的变化关系。

纯蓝光器件实现效率与稳定性双突破

基于HFPA改性纳米晶制备的纯蓝光钙钛矿QLED，发射峰精准落在467 nm的纯蓝光波段，完美匹配超高清显示的Rec.2020 标准。与未改性器件相比，该器件的外量子效率、最大亮度均实现十倍级提升，半衰期提升13倍，且在不同驱动电压下无明显光谱偏移，展现出极佳的光谱稳定性和工作稳定性。

图 4 基于氟代膦酸改性纳米晶的纯蓝光溴氯混合卤化铯铅钙钛矿QLED性能

a.以氟代膦酸改性纳米晶作为发光层的钙钛矿QLED器件结构示意图；b.钙钛矿QLED各功能层的能级图，各能级匹配实现高效的电荷注入与复合；c.基于原始纳米晶和氟代膦酸改性纳米晶的器件外量子效率 - 电流密度曲线，可见改性器件的效率得到显著提升；d.改性器件在不同驱动电压下的电致发光光谱，展现出优异的光谱稳定性，无明显光谱偏移；e.两种器件在恒流驱动下的工作寿命曲线，改性器件具有更长的半衰期；f. 本研究与已报道的纯蓝光混合卤化物钙钛矿QLED的最大亮度和外量子效率对比，证实本研究制备的器件性能更优。

配体设计为表面工程提供新思路

HFPAs作为短链氟代膦酸配体，相较于传统长链配体更利于电荷传输，其丰富的活性官能团可实现对钙钛矿纳米晶的精准改性，这一多功能配体的设计思路，为钙钛矿材料的表面工程提供了新的分子设计范式，具备良好的通用性和拓展性。

图 5 氟代膦酸分子特性及器件稳定性提升机制

a. 氟代膦酸分子的化学结构示意图；b. 氟代膦酸分子的静电势分布图谱；c. 多功能氟代膦酸修饰提升钙钛矿器件稳定性的作用机制示意图。

总结与展望

本研究提出的多功能氟代膦酸配体工程策略，成功解决了纯蓝光钙钛矿QLED效率低、稳定性差、光谱易偏移的核心难题，实现了材料改性与器件性能的双重突破。该策略通过多重化学作用实现了钙钛矿纳米晶的高效钝化与结构稳定，所制备的纯蓝光钙钛矿QLED在光电性能和稳定性上均达到了优异水平，弥补了纯蓝光钙钛矿器件的技术短板。

未来，团队将进一步优化器件制备工艺，降低规模化生产成本；同时拓展该配体工程策略的适用范围，开发性能更优异的表面修饰配体与处理方法，持续提升器件的长期工作稳定性。该研究将为高性能、高稳定性钙钛矿光电器件的研发提供全新思路与技术支撑，助力钙钛矿光电子学领域的创新发展与产业化应用。（来源：LightScienceApplications微信公众号）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41377-026-02214-8>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：陈冠英等 来源：《光：科学与应用》

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