



东北大学刘卯团队在卤化铅钙钛矿材料的研究中取得新进展

日期：2023年10月10日

来源：东北大学

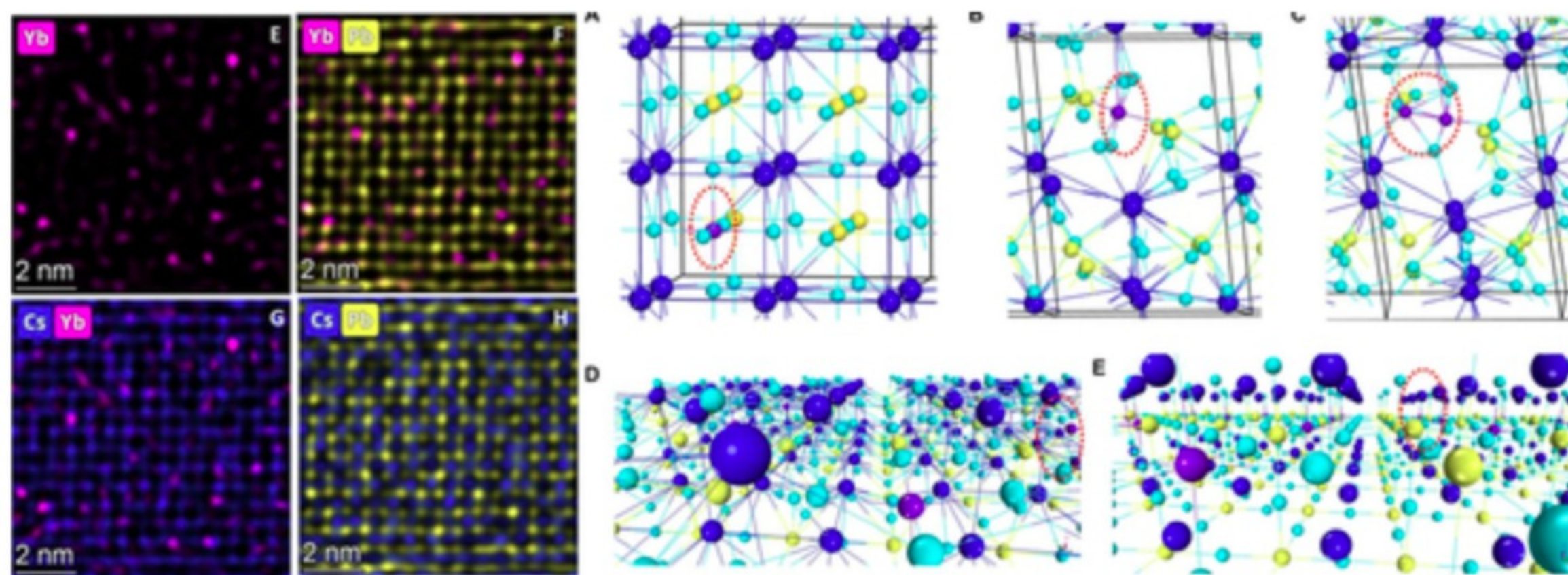
【大 中 小】

【打印】

【关闭】

近日，东北大学资源循环科学与工程专业刘卯教授课题组的研究成果“Atomic-scale Imaging of Ytterbium Ions in Lead Halide Perovskites”在线发表于Science子刊Science Advances上。

卤化铅钙钛矿由于其高吸收系数、缺陷容忍、可调带隙和优异的电荷转移性能等而引人注目，并在各种光电领域中表现出巨大的潜力，特别是掺杂稀土离子的材料，可以显著地提高其性能并拓宽其应用。自2017年首次发现Yb³⁺掺杂CsPbCl₃钙钛矿纳米晶以来，学术界关于钙钛矿中是否存在镧系离子(Ln³⁺)一直存在争议，如：Ln³⁺掺杂是否成功；卤化铅钙钛矿中Ln³⁺的取代位点尚不明确；Ln³⁺是否占据Pb²⁺的位点、晶格间隙位点和/或卤化物的空位。这对实验量化证明稀土的作用提出了巨大挑战。该研究首次使用透射电子显微镜直接在原子尺度识别了CsPbCl₃钙钛矿中的掺杂Yb³⁺，证实了Yb³⁺同时取代Pb²⁺并占据晶格间隙位置。此外，课题组还通过原子探针断层扫描术直接观察到近原子尺度的CsPbCl₃单晶的团簇现象。利用DFT模型进一步证实并解释了实验机理。该研究结果提供了对卤化铅钙钛矿中镧系离子掺杂机制的原子水平理解，并将引领掺杂对钙钛矿性能影响的新思路。



CsPbCl₃:Yb₃₊钙钛矿元素分布与计算的结构图

刘卯系资源循环科学与工程专业的教授，任辽宁省冶金资源循环科学重点实验室主任，长期从事国家战略矿产资源综合利用及相关材料设计与研发。

分享到：