



郑州大学物理学院在非铅双钙钛矿材料的高压研究取得进展

发布人: 杨明 信息来源: 物理学院 发布日期: 2020.02.19 阅读次数: 4693

近日, 郑州大学物理学院在非铅双钙钛矿结构与性质的压力调控方面取得积极进展, 相关成果以题为“Pressure-Induced Structural Evolution and Bandgap Optimization of Lead-Free Halide Double Perovskite (NH₄)₂SeBr₆”的论文在线发表于物理类知名期刊《Advanced Science》(影响因子: 15.804) 上。郑州大学为第一单位, 物理学院青年教师王玲瑞为第一作者, 郭海中教授、王飞副教授和吉林大学王凯教授为通讯作者。

在该研究中, 科研人员利用高压技术, 结合原位高压同步辐射X射线衍射光谱、原位高压拉曼光谱、原位高压吸收光谱、原位高压光学成像以及第一性原理计算, 对一种典型的非铅双钙钛矿 (NH₄)₂SeBr₆的结构和性能进行了系统研究。研究发现, (NH₄)₂SeBr₆在11.2 GPa发生结构相变, 空间群由Fm-3m变为P4₂。通过对高压吸收光谱和拉曼光谱的分析, 再次验证这一相变的发生。(NH₄)₂SeBr₆的光学带隙随着结构的变化逐渐减小, 并在6.57 GPa和11.18 GPa出现两次拐点。第一性原理计算表明, 高压下 (NH₄)₂SeBr₆的光学带隙主要与八面体[SeBr₆]₂-相关, 且两次带隙拐点分别与Br-Br键重组和结构相变有关。该研究首次揭示了Br-Br键重组和键长演变与光学带隙的关系机制, 对该类钙钛矿材料在光伏领域的应用起到积极推进作用。

该工作得到了国家自然科学基金、中国博士后科学基金、河南省博士后科研启动项目、郑州大学青年教师启动资金以及郑州大学优秀青年研究基金等项目支持。

文章链接: <https://www.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/advs.201902900> 郑州大学版权所有, 禁止非法转载! 2020-09-28 16:15:56

兼容Internet Explorer 8+、Firefox 18+、Safari 5+、Chrome 22+、Opera 12+等浏览器
版权所有 郑州大学 2000-2020