

锐意创新 协力攻坚 严谨治学 追求一流

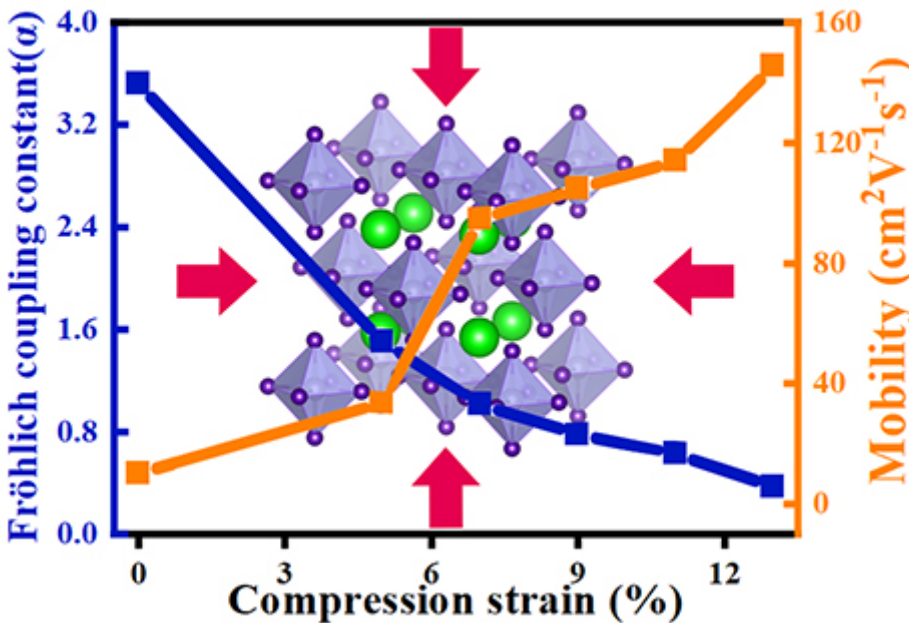
请输入关键字

🏠 首页 (../..../) > 新闻动态 (../..../) > 科研进展 (../..../)

我所揭示提高锡基钙钛矿载流子迁移率的有效机制

发布时间：2023-12-05 | 供稿部门：1117组

近日，我所分子反应动力学国家重点实验室分子光化学动力学研究组（1117组）袁开军研究员和隋来志副研究员团队通过第一性原理计算发现，施加压缩应变能够使钙钛矿材料 Cs_2SnBr_6 载流子迁移率提高一个数量级。



作为一种新型的环保替代品，锡基钙钛矿材料性能与传统的铅卤化物钙钛矿相当，但其毒性更低，有利于保护环境和人类健康。然而，由于强的极性光学声子对电荷载流子散射作用，导致载流子传输速率的降低，从而阻碍锡基钙钛矿材料在光电领域的应用。

为了解决这一问题，研究人员通过第一性原理计算发现，可以通过对晶格施加压缩应变的方式提高锡基钙钛矿材料的载流子迁移率。这一改进归因于电声耦合强度的减小，以及极性光学声子散射强度的减弱。压缩应变引起的电声耦合强度降低与极性光学声子散射的变化呈现出明显的关联。在 Cs_2SnBr_6 体系中，初始结构与13%压缩应变的结构相比，其最大载流子迁移率分别为 $11\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 和 $143\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 。该研究揭示了压缩应变对改善极性半导体中载流子传输的影响，并为通过压缩应变来减弱极性光学声子散射提供了证据。这一发现为环保锡基钙钛矿材料在光电器件中的应用提供了新途径。

相关成果以“Enhanced Carrier Transport in Cs_xSnBr_y by Reducing Electron-Phonon Coupling under Compressive Strain”为题，于近日发表在*Materials Today Physics*上。该工作的第一作者是我所1117组联合培养博士研究生曾祥榆。该工作得到国家自然科学基金、国家自然科学基金委基础科学中心、中国科学院关键技术研发团队等项目的资助。（文/图 曾祥榆、隋来志）

文章链接：<https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2023.101296>
(<https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2023.101296>)

DICP科普一下|载流子(http://www.dicp.cas.cn/kxpj/kxgs/202312/t20231205_6940398.html)

(<http://www.dicp.cas.cn/>)

地址：辽宁省大连市沙河口区中山路457号 邮编：116023
电话：+86-411-84379163 / 9198 传真：
+86-411-84691570
邮件：dicp@dicp.ac.cn
(<mailto:dicp@dicp.ac.cn>)



官方微信



(<https://bszs.cmethod=show>)

版权所有 © 中国科学院大连化学物理研究所 本站内容如涉及知识产权问题请联系我们 备案号：辽ICP备05000861号-1 (<https://beian.miit.gov.cn/>) 辽公网安备21020402000367号