

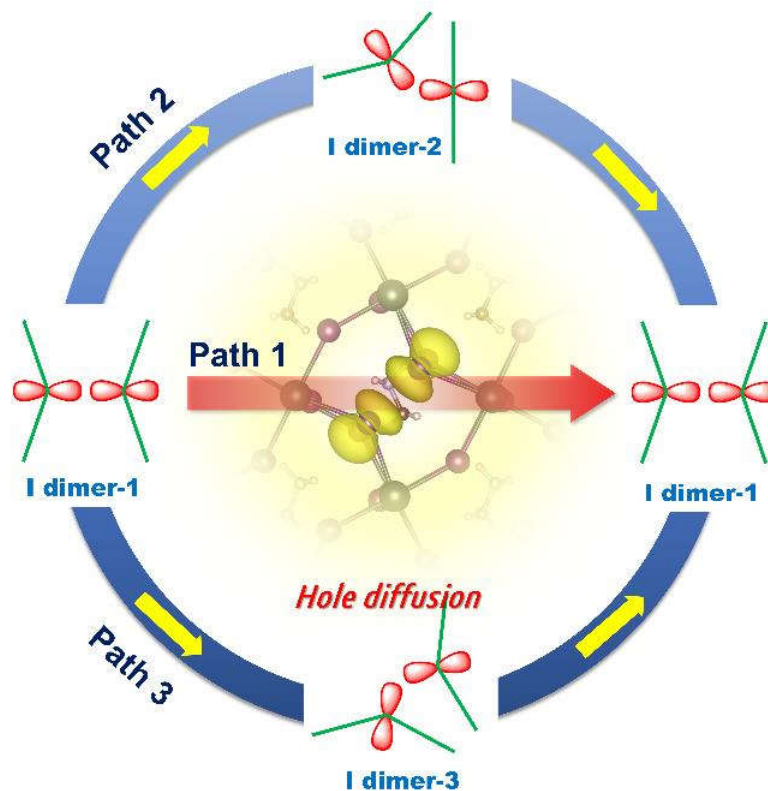
(/) 校园要闻 综合新闻 招生就业 合作交流 深度报道 图说华理 媒体华理 校报在线 通知公告 学术讲座
 (/news? /news? /news? /news? /news? /news? /news? (<http://xiaobao.ecust.edu.cn/>)
 important=1&category_id=1&category_id=2&category_id=3&category_id=4&category_id=5&category_id=21)

首页 (/) > 校园要闻 (/news?important=1)

Nano Letters报道华理有机-无机杂化钙钛矿光电材料理论研究新进展

稿件来源: 化学学院 | 作者: 刘慧慧 | 摄影: 刘慧慧 | 编辑: 凝聚 | 访问量: 29816

近日, Nano Letters以“Unique Trapped Dimer State of the Photogenerated Hole in the Hybrid Orthorhombic $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ Perovskite: Identification, Origin, and Implications”为题, 在线报道了我校化学学院计算化学中心/工业催化研究所在 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 钙钛矿光电材料方面取得的最新进展 (Nano Lett., 2017, doi:10.1021/acs.nanolett.7b03885)。



揭示光生空穴的固有特性和迁移过程对于提高 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 钙钛矿材料的光电转换效率非常重要, 但目前原子级别上对 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 钙钛矿材料中光生空穴的认识非常有限。基于高等杂化泛函计算并考虑自旋-轨道耦合效应, 研究者首次在 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 中发现了全新的空穴俘获形态 (I-I二聚体 1_2 -结构态)。计算结果表明这种空穴局域态比离域态更加稳定, 并且能促进空穴的快速迁移。此外, 对比含不同卤素的 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ (X=Cl, Br和I) 材料, 该研究还定量揭示空穴俘获能力与结构形变能之间具有很好的线性关系。性能优异的 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 材料具有较小的结构形变能和较弱的空穴俘获能力。这些理论结果对于深刻了解钙钛矿光电材料特性并提升其性能具有重要意义。

该工作由化学学院博士生彭超在王海丰教授和胡培君教授的指导下完成。研究得到了国家自然科学基金委重点基金、优秀青年基金、创新研究群体、上海市“曙光计划”和中央高校基本科研专项资金的资助。

论文链接: <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.nanolett.7b03885>
 (<http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.nanolett.7b03885>)

发布日期: 2017年11月21日08时59分

分享文章

更多



相关新闻

(/news?category_id=42&important=1)

- | | |
|--|------------|
| 【创新前沿】Water Research和Environmental Science & Technology先后报道我校在水污染控制领域最新研究成果[图文] (/news/44706?important=1&category_id=) | 2018-09-17 |
| 【创新前沿】Nature Communications发表我校光电限域效应操控可逆聚集诱导发光过程的研究成果[图文] (/news/44649?important=1&category_id=) | 2018-09-14 |
| 化学学院召开2018级新生开学典礼[图文] (/news/44699?important=1&category_id=) | 2018-09-13 |
| 【创新前沿】《德国应用化学》报道我校高价碘化学在有机合成研究领域中的新进展[图文] (/news/44594?important=1&category_id=) | 2018-09-07 |
| 【创新前沿】《德国应用化学》重点报道我校纯有机室温磷光材料领域研究新进展[图文] (/news/44567?important=1&category_id=) | 2018-08-28 |
| 【创新前沿】《德国应用化学》刊发我校纳米孔道研究综述文章[图文] (/news/44541?important=1&category_id=) | 2018-08-20 |
| 【创新前沿】Environmental Science & Technology报道我校在大气污染控制方面的研究进展[图文] (/news/44536?important=1&category_id=) | 2018-08-15 |
| 【创新前沿】Chemical Science报道我校近红外荧光前药领域新进展[图文] (/news/44501?important=1&category_id=) | 2018-08-03 |
| 【创新前沿】Science Advances报道我校费林加诺贝尔奖研究中心重要进展[图文] (/news/44515?important=1&category_id=) | 2018-08-02 |
| 【创新前沿】Nature Communications报道华理在蛋白纳米孔道灵敏位点的研究成果[图文] (/news/44489?important=1&category_id=) | 2018-07-26 |

新闻网管理平台登录 (http://newsadmin.ecust.edu.cn/admins/users/sign_in)

投稿须知 (/send_file)

联系我们

版权所有 © 华东理工大学党委宣传部

地址:上海市梅陇路130号 邮编:200237