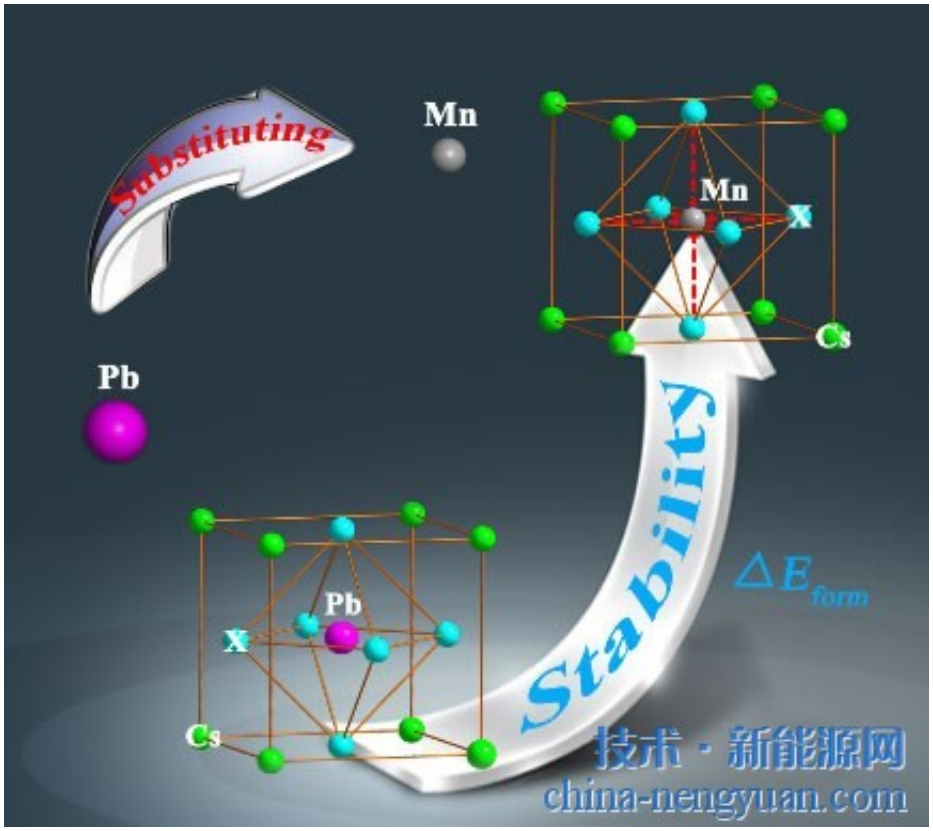
全无机CsPbX钙钛矿量子点稳定性研究获进展



全无机钙钛矿量子点（CsPbX3, X = Cl, Br, I）具有优异的光电性能，在太阳能电池、发光二极管以及激光等光电器件中展示出了巨大的应用前景。然而，与有机-无机杂化钙钛矿材料类似，含有卤素的全无机钙钛矿量子点由于自身晶体结构的不稳定性，在高温或潮湿环境中与空气接触极易分解，极大限制了此种材料的实际应用。为此，人们探索了像表面二氧化硅包覆、表面氯化等各种方法来增加其稳定性，但是这些方法并不能从根本上解决这一难题。如何大幅提高全无机钙钛矿材料稳定性的同时并调控其光电性能，已成为国内外众多科学家的研究热点。

在国家自然科学基金、中国科学院战略性先导科技专项、科技部“973”计划、中国科学院青年创新促进会等基金的资助下，中科院福建物质结构研究所洪茂椿课题组、陈学元课题组联合南京理工大学教授曾海波课题组，刘永升等科研人员提出了一种简单而高效的Mn2+取代策略，从稳定CsPbX3钙钛矿量子点晶格结构的角度出发，解决全无机钙钛矿量子点稳定性差的难题。通过密度泛函第一原理计算，研究团队发现当CsPbX3钙钛矿量子点晶格中的二价基质阳离子Pb2+（~1.33 Å）被离子半径小的Mn2+（~0.97 Å）少量取代后，其晶格就会因Mn2+掺杂而收缩。由于Mn-X键具有比Pb-X键高得多的解离能，这种晶格的收缩就会使得Mn2+掺杂的CsPbX3量子点的形成能（或结合能）相比于纯的量子点有所提高，在一定程度上稳定了CsPbX3钙钛矿量子点的晶格，从而能够大幅提高钙钛矿量子点的热稳定性、空气稳定性和光电性能。受益于此，研究团队还发现基于Mn2+掺杂的CsPbX3量子点构建的发光二极管呈现出了比纯量子点发光二极管更高的发光亮度、外量子效率和电流效率，这充分展示出Mn2+掺杂的CsPbX3量子点在构建高性能、长期稳定的光电器件等领域的优势。

该研究工作提供了一种稳定CsPbX3钙钛矿量子点的新策略，必将对全无机钙钛矿量子点的光电应用产生重要影响。上述研究成果近期以全文形式发表在《美国化学会志》，论文第一作者为博士研究生邹胜晗。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/112909.html