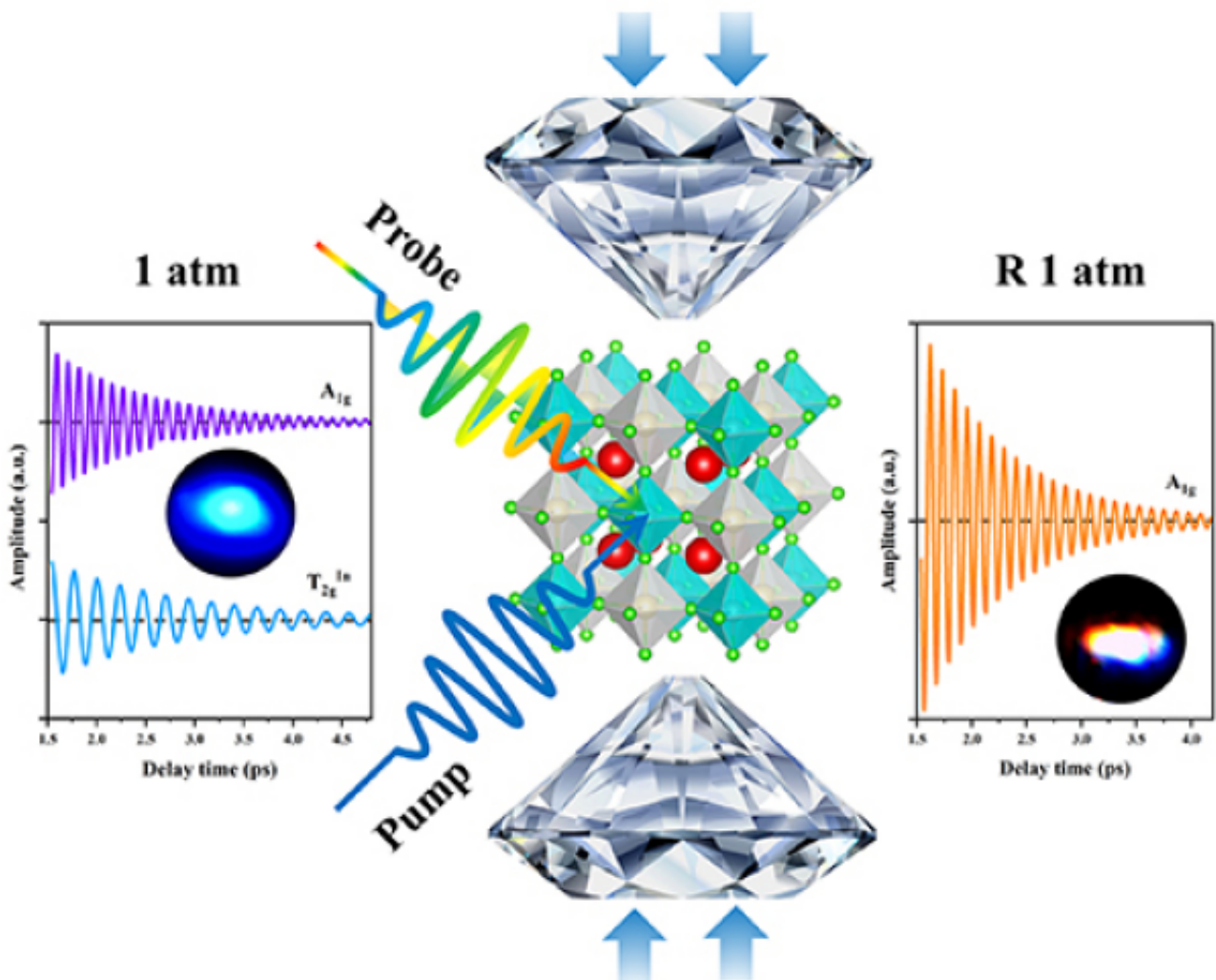


大连化物所揭示无铅双钙钛矿的白光发射机理



近日，中国科学院大连化学物理研究所化学动力学研究室分子光化学动力学研究组研究员袁开军和副研究员隋来志团队，利用自主开发的高压超快光谱，揭示了Cs₂NaInCl₆:Sb³⁺晶体经过高压作用后产生白光发射的机理。

随着固态照明技术的发展，寻找高效稳定的发光材料，尤其是单组分白光发光材料的研究得到广泛关注。其中，无铅金属卤化物钙钛矿材料由于强烈的电子-声子耦合作用可产生宽带自陷态激子（STE）发射而备受瞩目。钙钛矿中Sb³⁺离子的STE发射对晶体场环境具有敏感性。压力作为一种极端条件，可有效改变材料内部原子之间的相互作用，从而引起材料的电子结构和晶体场发生变化。因此，通过施加压力，有望精准调控Sb³⁺离子的STE发射，为实现单组分宽带白光发射提供了新途径。

袁开军团队致力于极端条件下先进材料的超快光谱和动力学研究，并取得了一系列进展。本工作剖析了无铅双钙钛矿Cs₂NaInCl₆:Sb³⁺晶体在高压条件下的光学性质，并结合高压光学、高压同步辐射以及理论计算进行了全面研究。研究表明，在高压环境下，Cs₂NaInCl₆:Sb³⁺晶体经历相变后STE发射强度显著增加，提升160倍。在高压释放后，Cs₂NaInCl₆:Sb³⁺晶体呈现出少见的白光发射的特性。

瞬态吸收光谱的测量表明，材料常压下以及经高压处理后会呈现相干声子振荡现象。在常压条件下，Cs₂NaInCl₆:Sb³⁺晶体中的电子与两类声子模式（A_{1g}和T_{2gIn}）发生显著的耦合。然而，经过高压处理后，电子与T_{2gIn}模式的声

子耦合消失，表明局部八面体的对称性遭到破坏，产生了非对称的晶体场环境。这种环境改变造成新的低能STE发射，从而使得晶体呈现白光发射现象。该研究揭示了电子-声子耦合与STE发射之间的密切关系，为设计和合成新型单组分白光金属卤化物钙钛矿提供了新策略。

相关研究成果以Uncovering White Light Emission in Pressure-Treated Sb-Doped Double Perovskite by Coherent Optical Phonon为题，发表在《先进功能材料》(Advanced Functional Materials)上。研究工作得到国家自然科学基金和中国科学院等的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/206751.html>