

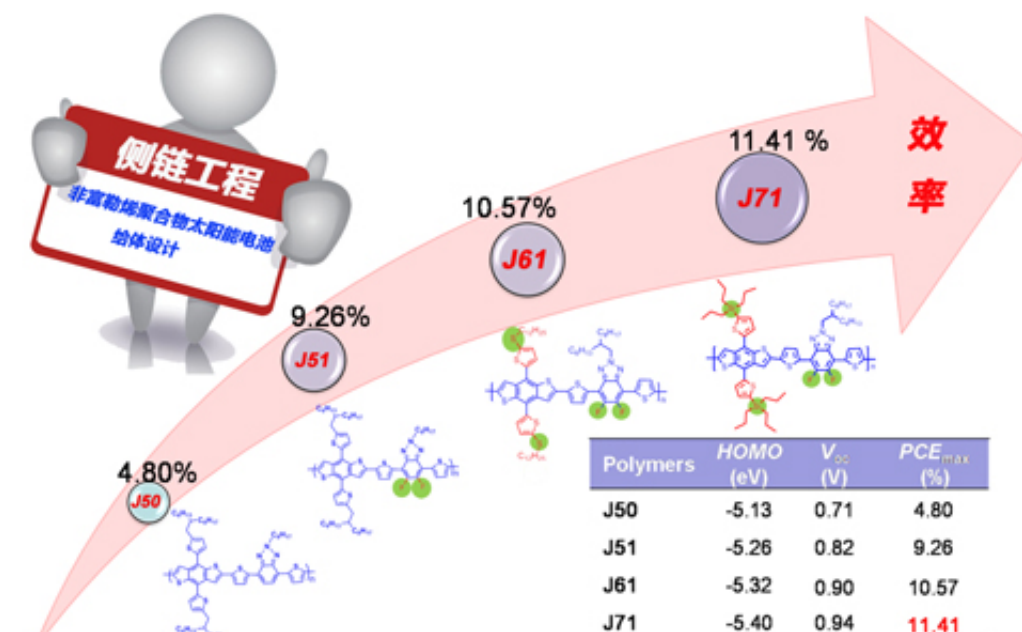
非富勒烯聚合物太阳能电池给体光伏材料侧链工程研究获进展

聚合物太阳能电池具有结构和制备过程简单、成本低、重量轻、可制备成柔性器件等突出优点，成为近年来国内外研究热点。将富勒烯衍生物受体用n-型有机半导体材料取代，可以克服富勒烯受体存在的可见光区吸光弱、能级调控困难和形貌稳定性差等缺点，近年来受到研究者的关注。多种性能优异的非富勒烯型受体被设计出来，如窄带隙n-型聚合物受体N2200和有机半导体受体ITIC。

中国科学院化学研究所有机固体院重点实验室李永舫课题组研究人员发展了一系列基于噻吩取代苯并二噻吩(BDTT)与苯并三氮唑(BTA)单元的中间带隙二维共轭聚合物给体材料，通过侧链工程降低了HOMO能级，增强了链间相互作用，提高了空穴迁移率。使基于这类聚合物为给体、ITIC为受体的非富勒烯聚合物太阳能电池的能量转换效率达到11.4%。

研究人员在前期工作中发现，BTA单元上的两个氢原子被氟原子取代，聚合物的HOMO能级下移0.13 eV，同时空穴迁移率显著提高 (Chem. Mater. 2012, 24, 3247-3254)。利用这类聚合物在可见-近红外区与ITIC受体吸收互补的特点，制备了以这类聚合物为给体、ITIC为受体的非富勒烯聚合物太阳能电池。得益于氟取代聚合物J51较低的HOMO能级和较高的空穴迁移率，与无氟取代的聚合物J50相比，基于J51器件的开路电压(V_{oc})从0.71 V提高到0.82 V，能量转换效率(PCE)从4.80%提高到9.26% (Adv. Mater. 2016, 28, 8288-8295)。考虑到0.82 V的 V_{oc} 仍然不够高，研究人员根据先前的经验 (Energy Environ. Sci. 2014, 7, 2276-2284)，将硫烷基引入到BDTT单元的噻吩共轭侧链上进一步降低了聚合物的HOMO能级，同时还使其吸收光谱红移。另外还发现所得聚合物J61更有利于采取平行于衬底方向的分子排列，这些因素都有利于提升光伏性能。基于J61与ITIC的器件 V_{oc} 和PCE分别提高到约0.9 V和9.52% (J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 4657-4664)，通过器件进一步优化使效率达到了10.57% (J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 15011-15018)。

硅烷基侧链在共轭聚合物光伏材料的构筑上很少受关注。尽管在有机官能团的构筑中，三甲基硅烷通常作为一种保护基团使用，但很少有人关注硅烷基链的电子效应。有机固体实验室的研究人员首次在BDTT和氟取代BTA共聚物的噻吩共轭侧链上引入硅烷基来调制聚合物的电子结构和光伏性能。研究发现，得益于硅原子 σ^* 与芳香体系 π 轨道的相互作用，所得聚合物J71具有更低的HOMO能级。另外，较长的C-Si键也让硅原子上的三取代烷基链距离主链更远，增加了分子的有序堆积和聚合物的结晶性。采用J71与ITIC共混制备的非富勒烯聚合物太阳能电池 V_{oc} 进一步提升至0.94 V，器件效率达到11.41%。这一体系在给受体HOMO能级差只有0.11 eV的情况下仍然获得了高效的受体激子电荷分离，从而获得了兼具高的开路电压和高的短路电流的光伏器件，这对于重新认识聚合物太阳能电池中的激子电荷分离的驱动力具有重要意义，也为将来的高效共轭聚合物给体光伏材料的分子设计提供了一种新思路和新途径，将对有机光伏领域的发展起到促进作用。该工作已在《自然-通讯》发表 (Nat. Commun. 2016, 7, 13651)。



图：非富勒烯聚合物太阳能电池给体光伏材料的侧链工程及其HOMO能级和器件性能

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/102253.html>