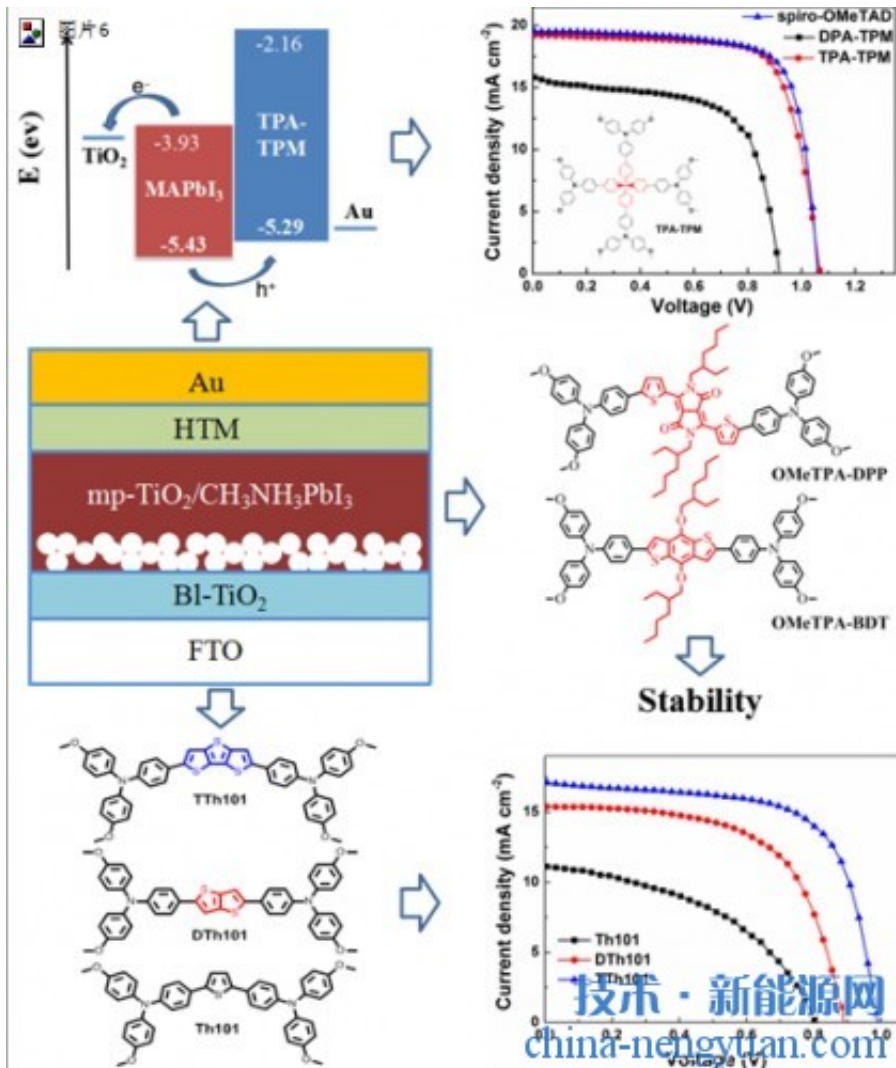


钙钛矿太阳能电池中有机空穴传输材料研究获系列进展



近期，中国科学院合肥物质科学研究院应用技术与农业工程研究所孔凡太研究团队在小分子有机空穴传输材料方面取得系列进展，相关研究结果分别发表在ChemSusChem、Elsevier Dyes and Pigments，以及英国皇家化学会的RSC Advances上。

小分子类空穴传输材料已经被证明在钙钛矿太阳能电池中有非常好的应用潜力。目前应用最广泛的空穴传输材料是spiro-OMeTAD，然而其合成步骤复杂、成本很高，且在空气中稳定性较差。因此开发新型空穴传输材料是钙钛矿太阳能电池产业化必不可少的部分，为了开发高效稳定廉价的小分子空穴传输材料，将常用于有机电池和OLED中的四苯甲烷结构引入到小分子空穴传输材料中。

由于四苯甲烷是星爆型，不存在螺旋核的分子内张力，使其具有好的成膜性和高稳定性，孔凡太研究团队以四苯甲烷为核，外围接上苯胺基团设计开发了两种小分子，并合成了一个以苯甲醚为外围基团的参考分子。研究发现在这三种分子中，由于DPA-TPM和PA-TPM分子的溶解性较差，SEM和AFM表明两者成膜性也不如TPA-TPM和spiro-OMeTAD，且空穴迁移率较低，应用到钙钛矿器件性能较差。进一步研究发现以四苯甲烷为核的另一个分子（TPA-TPM）显示出高的玻璃化转变温度，高的水接触角，很好的成膜性和较高的空穴迁移率。以TPA-TPM为空穴传输材料的钙钛矿太阳能电池性能比得上spiro-OMeTAD，而且基于其稳定性高于spiro-OMeTAD，显示出了良好的应用潜力。

另外，团队也将常用于聚合物空穴传输材料中的苯并二噻吩和吡咯并吡咯二酮两种结构作为连接桥引入到小分子空穴传输材料中。研究发现这两种化合物对可见光吸收较差，最高占有分子轨道（HOMO）能级合适、溶解性较好且化合物稳定。将其应用到钙钛矿太阳能电池中发现都表现出较好的性能，虽然光电转换效率相比于spiro-OMeTAD较低

，但是由于其HOMO能级较低，化合物的开路电压较高。由于化合物中引入了疏水的长链基团，使基于其的电池在高湿度下展现出了较好的稳定性。实验结果证明了这两种化合物有较好的应用潜力。为了进一步研究小分子空穴传输材料结构对分子和器件性能的影响，团队开发了三种不同桥的小分子空穴传输材料，通过逐步增加分子桥的共轭性研究其对分子和器件的影响。研究发现随着共轭桥耦合度的增加，分子的吸收红移，HOMO能级降低，热稳定性增加，空穴迁移率明显增高。荧光和电化学阻抗谱（EIS）研究发现桥耦合度的增加能够提高电子-空穴在钙钛矿/空穴传输材料界面的分离，从而提升电池效率。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/111085.html>