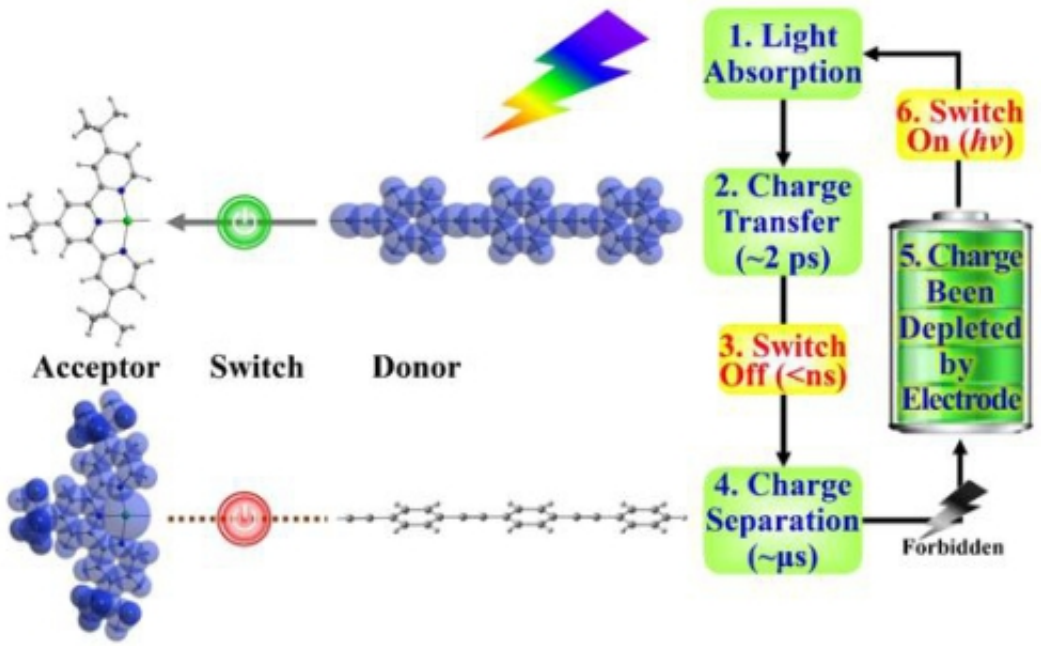
中国科大提出首个自适应开关的有机分子太阳能电池设计



近日，由中国科学技术大学微尺度物质科学国家研究中心教授罗毅领导的研究小组的教授江俊利用第一性原理计算，提出了首个自适应开关的有机分子太阳能电池设计。该方案具有低成本、高效、自适应的优点。

太阳能电池极具应用前景。虽然基于有机分子的太阳能电池具有材料来源广泛、价格低廉、工艺简单、柔韧性好、易于大规模生产、轻薄柔软易携带、可降解、环境污染小等诸多优点，但其光电转换效率不高，与无机半导体太阳能电池相比仍有较大差距。这是因为光能被有机分子吸收后，虽然会发生从给体部分到受体的电荷转移，但有机分子的载流子迁移率较低，含能的激发态电子往往被束缚在同一个小分子里，使得未经彻底分离的电子和空穴很容易发生复合，大大降低了最终的光电转换效率。

江俊课题组长期致力于光电功能分子和光催化体系设计与模拟领域的研究，聚焦于电子运动这一关键主线，基于第一性原理模拟进行结构设计以调控电子被光激发后演化行为。在此次研究中，光开关分子偶氮苯被插入到一个典型的给体-受体体系（三联吡啶铂配合物）中，组成一个给体-光开关-受体体系。第一性原理计算表明，该分子具有平面共轭构型，可以吸收可见光，产生的受激电子会从偶氮苯和给体迅速转移到能级更低的受体上（时间约为2皮秒）；而失去电子的偶氮苯分子顺反异构势垒会降低，从而自发发生从反式到顺式的构型转换（时间尺度为皮秒-纳秒量级）；分子构型转变导致体系的共轭结构被破坏，导电性也大大降低，受体上的含能受激电子无法回到偶氮苯和给体，于是电子和空穴分别被储存在受体和给体上，实现了高效的电荷分离（激发态寿命为微秒量级）；当受激电子被消耗（流入电极）之后，分子回到基态，此时的偶氮苯仍处于顺式构型，由于偶氮苯自身的特性，顺式分子能够吸收可见光转换回到反式构型，并开始下一轮循环。

该体系抑制了有机太阳能电池中的电荷复合过程，实现了高效的电荷分离和分子导电性的自动切换，是首个自适应开关的有机太阳能电池设计。此外，给体-光开关-受体体系不仅仅局限于偶氮苯和三联吡啶铂配合物分子，其他光开关分子和给体-受体体系也可以用于这一复合体系中。这一设计采用有机物小分子作为材料，解决了有机太阳能电池中容易发生电荷复合和导电性无法切换的问题，为低成本、易合成的有机分子体系大规模用于太阳能电池、光催化等领域提供了研究思路。

相关研究成果发表在《物理化学快报》上，博士研究生伍子夜、博士崔鹏、张国桢为共同第一作者，江俊为通讯作者。该研究得到了国家重点基础研究发展计划青年科学家专题项目、国家自然科学基金、中国科学院战略性先导科技专项的资助。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/121540.html