

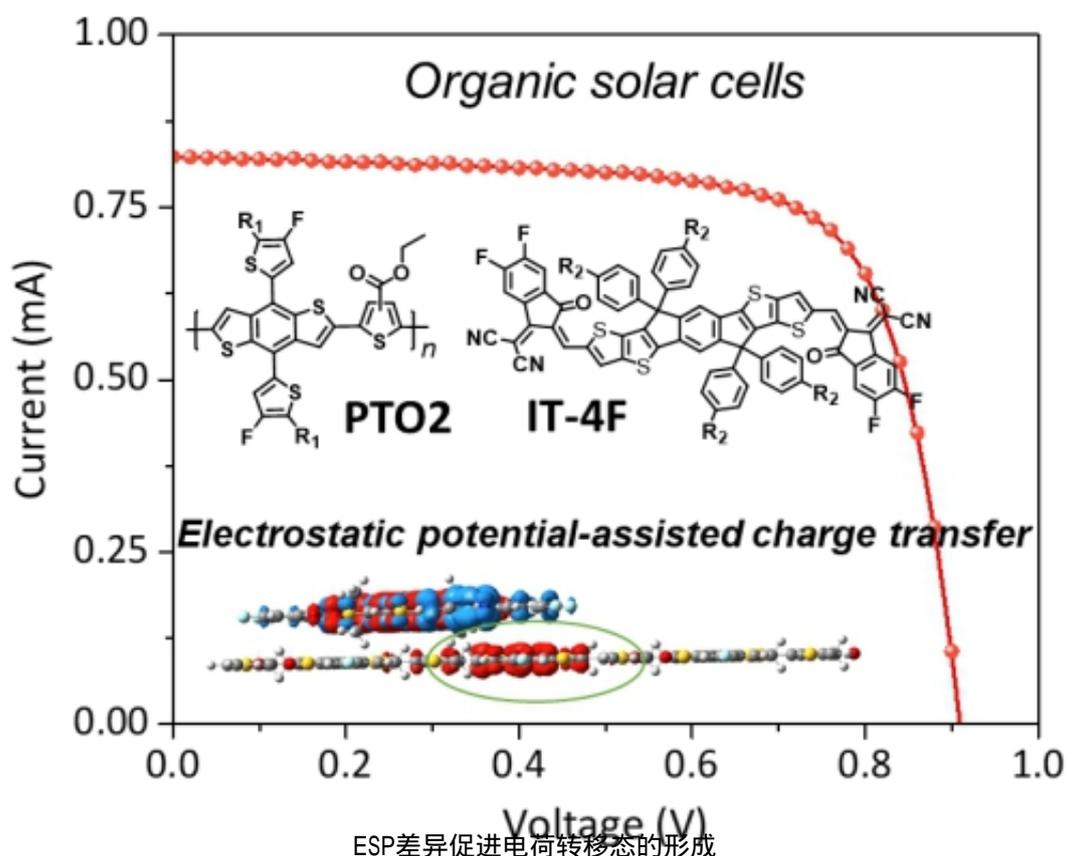
## 化学所有机太阳能电池中电荷转移机理研究获进展

近年来，有机太阳能电池（OPV）领域取得了迅猛发展，其光电转化效率已经突破了15%，展现了光明的应用前景。从光活性材料的化学结构特点理解OPV中电荷转移机理，特别是低能量损失下激子解离的驱动力来源，对于设计新材料提高电池性能具有重要意义。

在中国科学院和国家自然科学基金委支持下，中科院化学研究所高分子物理与化学实验室侯剑辉课题组的姚惠峰等人，开展了有机光伏分子化学结构与电荷产生机理间构效关系的相关研究。在前期的工作中(Chin. J. Chem. 2018, 36, 491-494)，研究人员发现OPV中电子给体和电子受体的分子表面静电势（ESP）存在较大差异，促进了电荷的高效生成。

最近，姚惠峰等人设计了新颖的聚合物给体材料PTO<sub>2</sub>，并详细研究了分子表面ESP对电荷转移过程的影响机制。研究表明，PTO<sub>2</sub>与非富勒烯受体材料IT-4F存在显著的ESP差异，相应的分子间电场提供了激子解离的驱动力，促进了电荷转移，基于此的电池具有高效的电荷生成效率；而在PTO<sub>2</sub>与富勒烯衍生物受体的界面，ESP的差异相对较小，电荷转移需要额外电场的辅助。

此外，研究人员与瑞典林雪平大学和隆德大学的合作者在器件和光物理方面开展了相应研究，对ESP理论具有重要支撑。该工作建立了分子结构与电荷转移过程的联系，为高效率光伏材料的设计提供了新思路。相关研究成果发表在近期的《美国化学会志》（J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 7743-7750）上。



原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/142803.html>