

国家纳米中心等在全小分子有机太阳能电池研究中取得进展

有机太阳能电池（OSCs）因重量轻、柔韧性好、成本低等特点，在柔性便携设备上具有商业潜力。随着分子设计的发展和器件工艺的优化，基于聚合物给体/非富勒烯受体的太阳能电池的效率提高到约18%以上，但聚合物批次性差异大的问题限制了其商业化应用。与聚合物太阳能电池（PSCs）相比，溶液可加工全小分子有机太阳能电池具有明确的分子结构、优异的材料与器件可重复性，利于实现工业化应用。小分子体系主要难点是活性层形貌调控，限制了进一步提升效率。

中国科学院国家纳米科学中心纳米系统与多级次制造重点实验室研究员魏志祥团队致力于可溶性有机小分子太阳能电池材料研究，优化活性层形貌、提高器件性能，实现了电池效率的持续提升，并发展出一系列分子设计策略，拓展了对于小分子太阳能电池原理机制的理解，例如，利用氟化端基策略（*Nat. Commun.* 2016, 7, 13740）以及扩大给体单元的稠环提高给体材料的结晶性（*Nature Commun.*, 2019, 10, 5393），实现多级次形貌的有效调控；运用烷基链的支链外移等调节策略（*ACS Appl. Mater. Interfaces* 2020, 12, 22, 25100-25107；*Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 2005426；*Adv. Energy Mater.*, 2014, 4: 1400538）以及引入液晶小分子（*Adv. Energy Mater.* 2019, 9, 1803175），实现结晶性和相容性的调控；通过加热基底调控垂直相分布（*Adv. Energy Mater.* 2017, 7, 1701548）；应用相似相容策略，引入第三组分在加热条件下实现三元体系从合金模型向级联模型转变（*J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 4, 1549–1556）。

近日，该团队与国家纳米中心研究员裘晓辉课题组合作，以全小分子有机太阳能电池ZR-TT/Y6为基础，引入受体材料的同源聚合物PJ1作为相界面相容剂，以加强给受体的相互作用、改善给受体活性层形貌，将能量转换效率从14.3%提高到15.5%。结果表明，PJ1在活性层中位于给受体界面，增强了给体受体间的相互作用，使活性层中分子堆积更加致密，从而实现活性层形貌的优化，加快空穴转移速率，最终获得能量转换效率的提升。该聚合小分子受体添加策略具有普适性，为全小分子有机太阳能电池的形貌优化提供了新思路。相关成果以Polymerized Small-Molecule Acceptor as an Interface Modulator to Increase the Performance of All-Small-Molecule Solar Cells为题，发表在《先进能源材料》上。

在新材料设计与合成方面，该团队与美国北卡罗莱纳州立大学教授Harald Ade等合作，从小分子给体设计入手，将小分子给体的侧基苯环中的硫醇烷基链从对位移动到间位，设计并合成了两个小分子给体P-PhS和M-PhS。与P-PhS相比，M-PhS的分子平面性和表面张力均有提高，在与小分子受体BTP-eC9共混后，在拥有良好相容性的同时，M-PhS还保持了其有序堆积能力。结果显示，基于M-PhS/BTP-eC9的器件形貌具有良好的结晶性和多尺度相区结构，实现了激子分离和电荷传输的协同优化，短路电流和填充因子的同时提高，在二元全小分子太阳能电池中取得了16.2%的创纪录效率。研究表明，提高材料结晶性的同时，降低给体材料和受体材料表面能的差异性来提高相容性，是获得高性能全小分子太阳能电池的有效策略。相关成果以High Miscibility Compatible with Ordered Molecular Packing Enables an Excellent Efficiency of 16.2% in All-Small-Molecule Organic Solar Cells为题，发表在《先进材料》上。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项（B类）的支持。

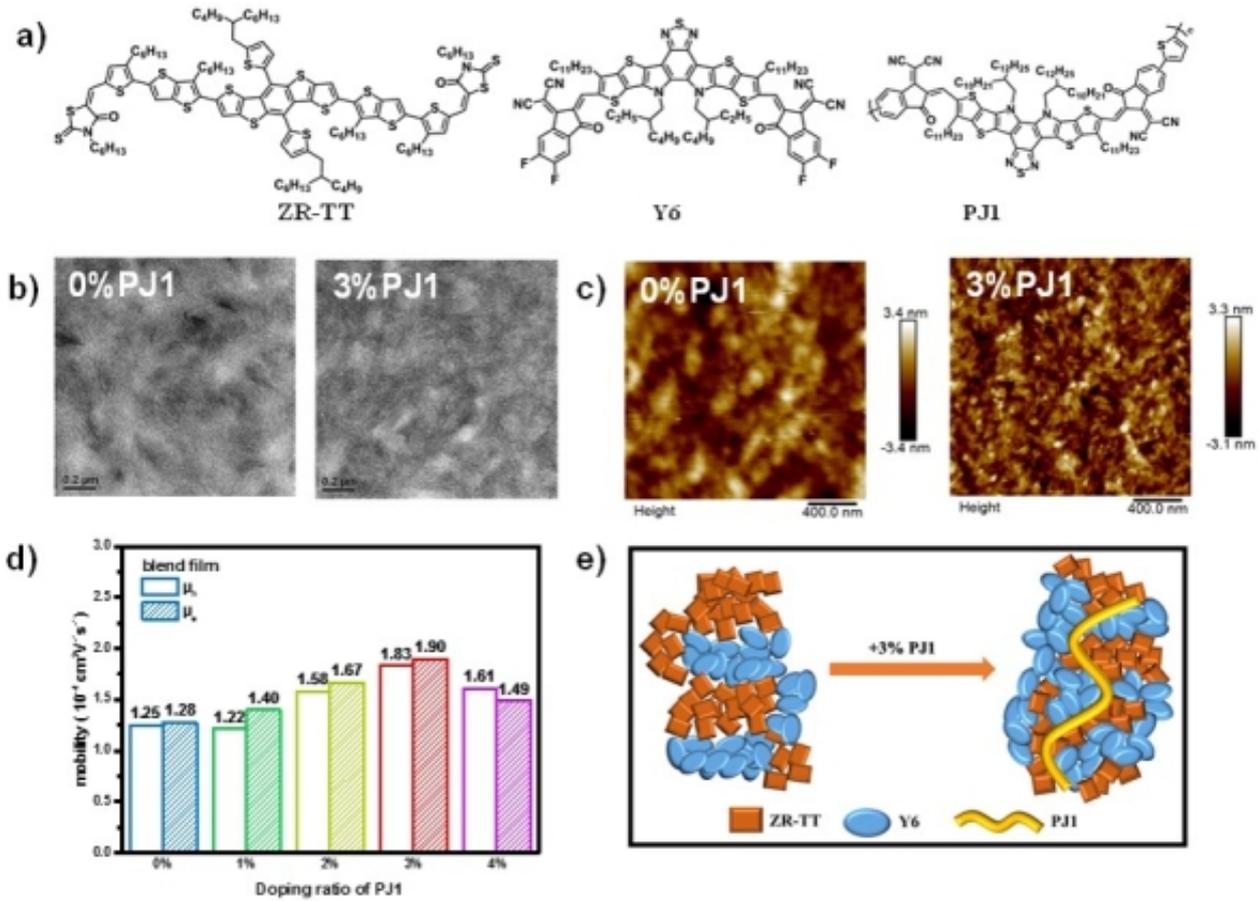


图1. (a) 分子结构、(b) TEM图、(c) AFM图、(d) 电子/空穴迁移率在添加PJ1前后的差异、(e) PJ1优化活性层形貌的示意图

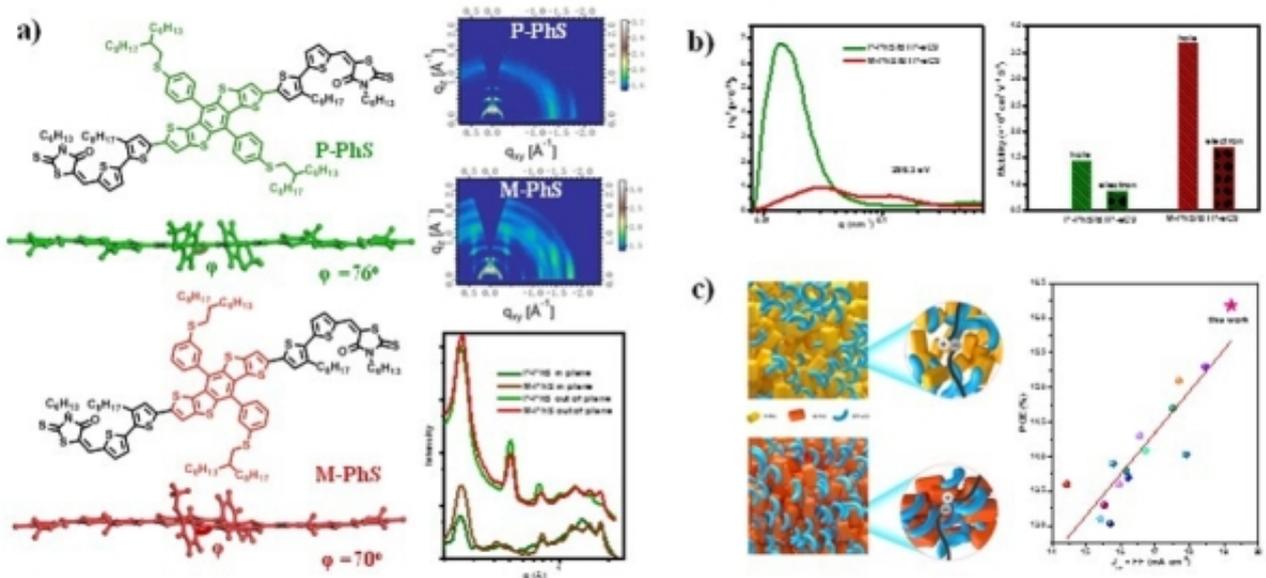


图2. (a) 分子结构与其对应的GIWAXs图、(b) RSOXs图与共混膜的空穴和电子迁移率图、(c) 基于P-PhS/BTP-eC9和M-PhS/BTP-eC9的形貌示意图以及(填充因子 × 电流)与效率总结图

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/177093.html>