

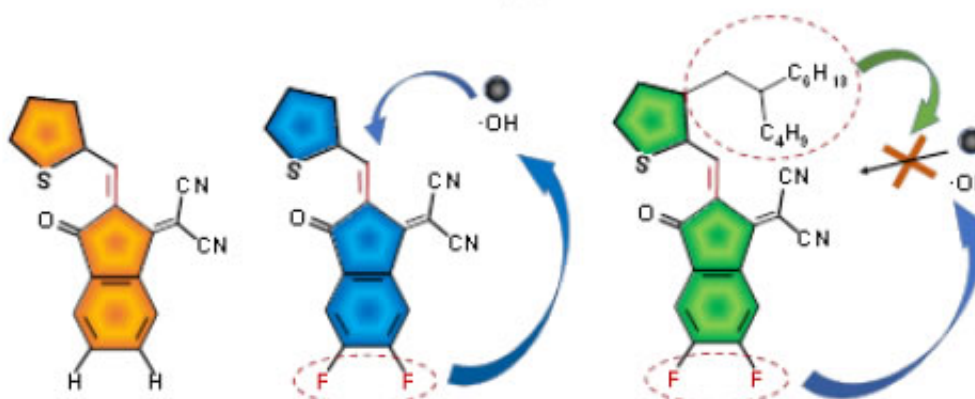
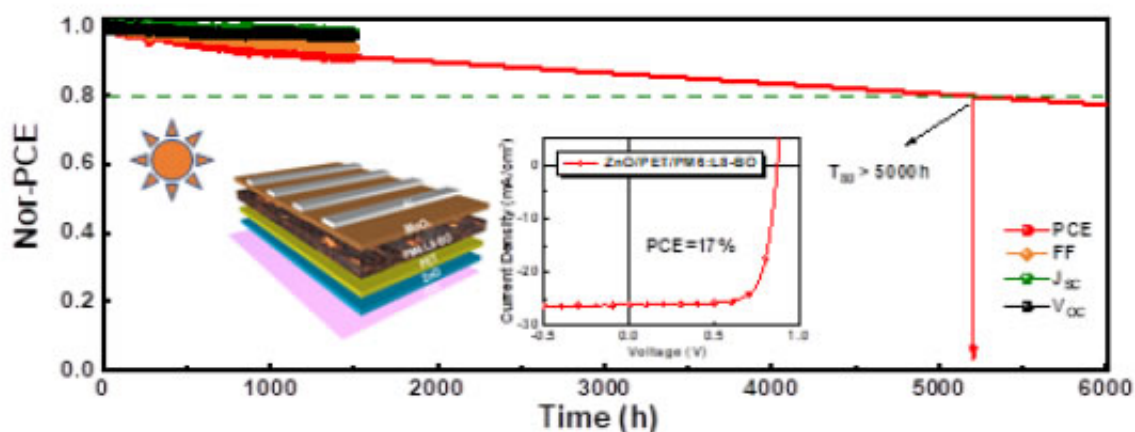
苏州纳米所等通过分子结构优化结合表面钝化获得高效稳定非富勒烯太阳能电池

当前，高效率的有机太阳能电池多基于非富勒烯受体。随着研究深入，新的非富勒烯受体分子被不断设计合成，相应的器件效率也在提升。而器件的稳定性尚未达到商业化要求。已有研究报道了非富勒烯受体分子结构与器件效率之间的关系，而关注非富勒烯受体分子结构与器件稳定性之间关系的工作相对较少。探索受体分子结构与器件稳定性之间的关系，可为后续设计合成高稳定性受体分子提供思路，具有重要意义。

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所印刷薄膜光伏实验室项目研究员骆群、研究员马昌期，联合北京师范大学副教授谭宏伟团队，探究非富勒烯受体分子结构与器件稳定性之间的关系。前期研究（*Sol. RRL*, 2021, 5, 2000638）揭示了ZnO在光照下会产生羟基自由基，进一步，羟基自由基与非富勒烯受体发生界面反应导致受体分子的端基和稠环核连接的C=C发生断裂的器件失效机理。

在前期研究的基础上，科研人员剖析受体分子的结构对器件稳定性的影响。研究选取不同分子结构的四种非富勒烯分子作为受体，比较了基于四种受体器件的稳定性。结果表明，受体器件稳定性规律为IT-4F>Y6≈N3>ITIC。进一步的光谱分析结果表明，四种受体的光降解速率与其对应的器件的衰减速率表现一致。这表明受体的光降解速率是决定器件衰减速率的关键因素，而受体分子中端基卤素取代以及内核的β-烷基是影响其光降解速率及器件衰减速率差异的关键。DFT理论计算结果表明，端基F元素的修饰使端基和稠环核连接的C=C键合能降低，导致其更易与羟基自由基发生反应。此外，F原子与ZnO表面氧空位和羟基的吸附能更强，致使表面的羟基更易离去，进而产生更多的羟基自由基破坏受体，因而受体端基含F原子使衰减加快。而β-位烷基链能与环外双键中的氢原子发生远程作用形成“原子笼”，从而阻挡ZnO表面产生的羟基自由基对C=C进攻，进而提高非富勒烯受体材料的稳定性。基于实验和理论计算的结果，研究选择β-位具有更大烷基链的非富勒烯小分子L8-BO作为受体材料，结合ZnO表面的界面修饰，获得能量转化效率超过17%的有机太阳能电池，且该电池具有良好的稳定性，其T80和Ts80分别达到5140和6170小时。

该研究为后续开发高稳定性非富勒烯受体分子提供了思路。相关研究成果在线发表在Advanced Science上。



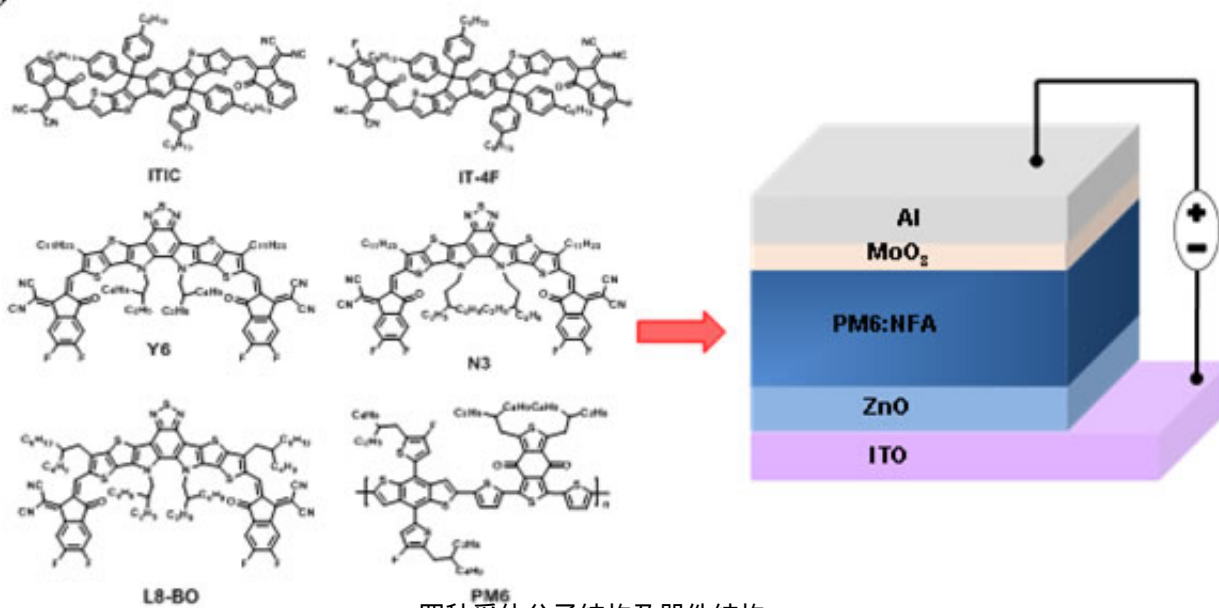
Most stable

Most instable

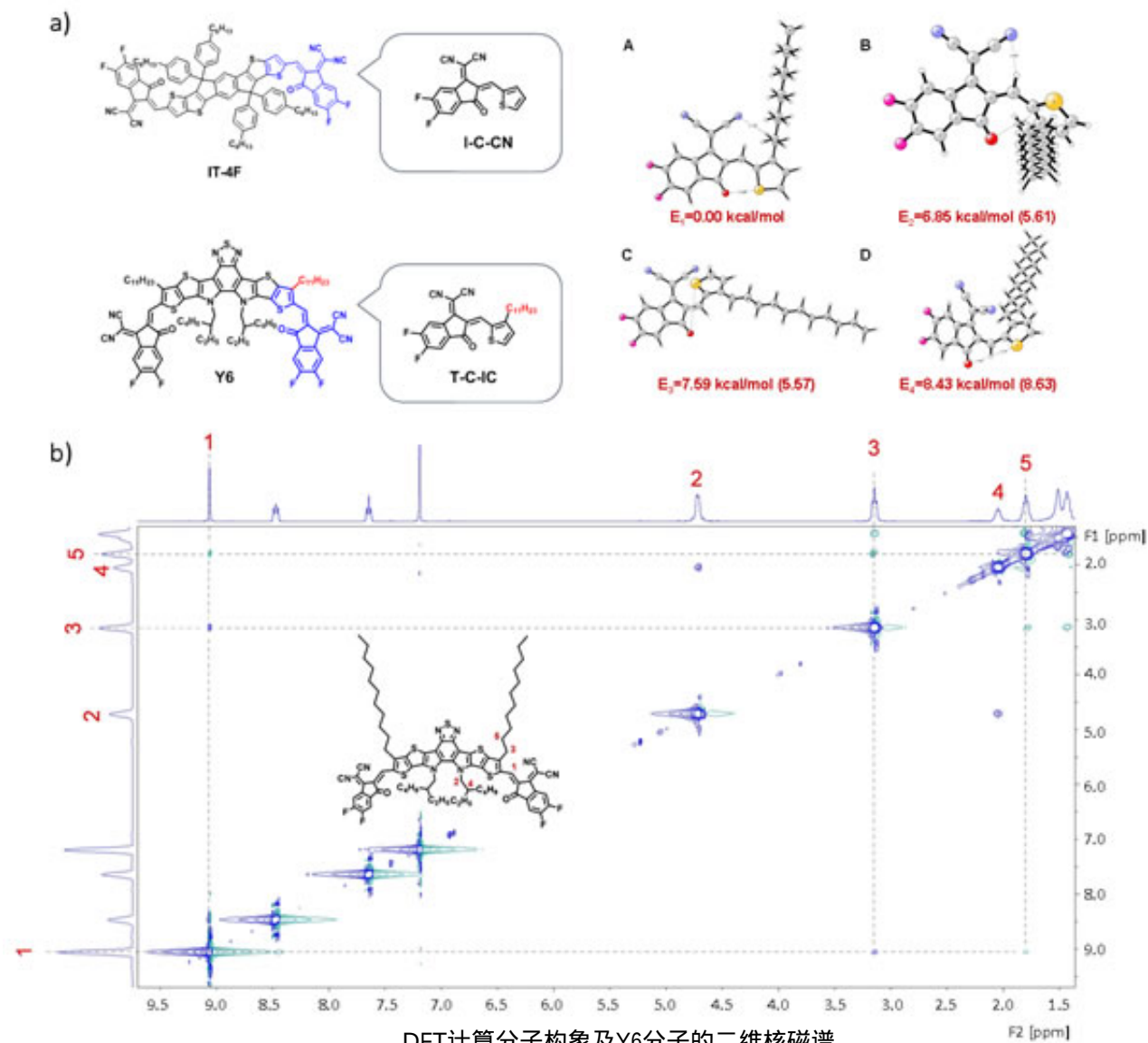
Most stable

苏州纳米所等通过分子结构优化结合表面钝化获得高效稳定非富勒烯太阳能电池

a)



四种受体分子结构及器件结构



原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/179048.html>