全小分子有机太阳能电池研究获进展

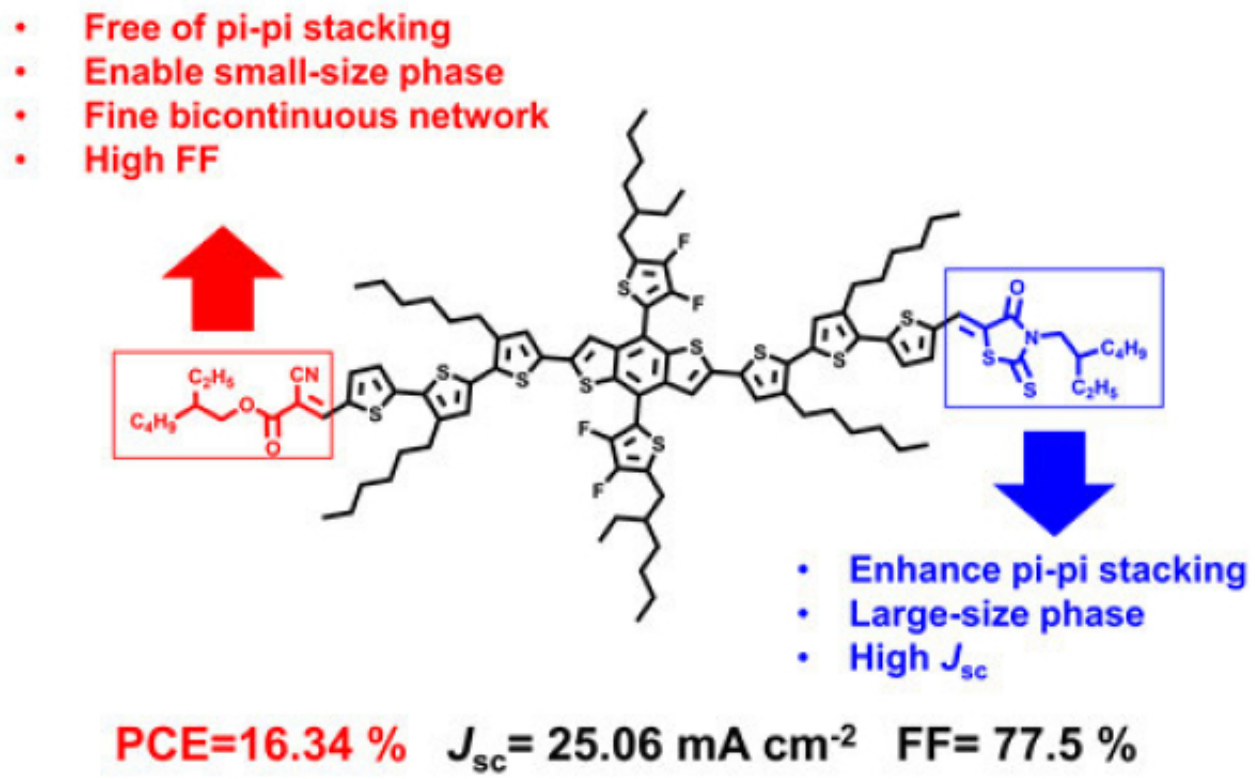
有机太阳能电池（Organic solar cells，OSCs）凭借质轻、可溶液法加工、成本低等独特的优势，受到广泛的关注和研究。目前，高效率的OSCs吸光活性层由聚合物给体和小分子非富勒烯受体组成，但聚合物本征的分子量多分散性使其存在批次差异性，会造成光电转化效率（PCE）的不同，不利于未来的大批量制备。相比之下，全小分子有机太阳能电池由于化学结构确定、重复性好和批次差异小等特点，得到越来越多的关注。同时，不理想的微相分离形貌限制了其PCE的进一步提升。给受体类似的A-D-A型结构使得合理的调控相形貌成为较大的挑战，高结晶性和合适的相分离尺度往往相互制衡，造成相对较低的PCE（通常＜16%）。

中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员葛子义的带领有机光电材料与器件团队，前期研究（Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 2808-2815）发现，在小分子给体侧基引入双氟原子，能显著改善分子pi-pi堆积、激子解离和电荷传输，最终获得超过13%的光电转化效率。进一步优化后处理工艺，全小分子器件PCE进一步提升至15.4%，同时阐释了热退火和溶剂退火对于调整活性层形貌存在不同的运作机理（Adv. Energy Mater., 2021, 2100800）。

近日，该团队在全小分子有机太阳能电池领域取得了新进展。研究首次将端基非对称取代策略运用于小分子给体材料中。通过组合一系列不同吸电子能力的端基——氰基乙酸酯（CA）、罗丹明（Reh）、和茚酮（ID），研究设计合成了一系列新型的小分子给体材料——SM-CA、SM-CA-Reh、SM-Reh、SM-CA-ID和SM-ID。与小分子受体N3共混时，研究发现基于SM-CA-Reh:N3的器件整合了SM-CA:N3高填充因子和SM-Reh:N3高电流的特点，最终器件效率从15.41%（SM-CA:N3）显著提升至16.34%。该效率同时是目前公开报道的二元全小分子太阳能电池的最高值。而基于SM-CA-ID和SM-ID的器件效率逐渐下降，分别为8.20%和2.76%。通过表征微观的分子堆积和整体的相分布，研究发现分子的pi-pi堆积是决定相分离形貌的主要因素，而非结晶性或者偶极作用。同时，SM-CA-Reh:N3中由于罗丹宁的引入，相尺寸略微增大，仍保持了SM-CA:N3中较好的相分离网络。这较好解释了基于SM-CA-Reh:N3的器件对于SM-CA和SM-Reh光伏性能的整合。

相关研究成果以Asymmetric Substitution of End-Groups Triggers 16.34% Efficiency for All-Small-Molecule Organic Solar Cells为题，发表在Advanced Materials上。研究工作得到中科院国家纳米科学中心和华南理工大学的支持，并获得国家杰出青年科学基金、国家自然科学基金等的资助。

小分子给体材料的端基调控策略和OSC性能



原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/182890.html