

青岛能源所关于高效稳定有机太阳能电池的研究获进展

有机太阳能电池（OSC）由于本征柔性、质轻、半透明等特点，在便携能源、光伏-建筑一体化、节能玻璃及高效农业等领域具有广阔的应用前景。不同于硅基等无机光伏电池，OSC的给受体异质结界面问题更为复杂，因而调控活性层本体异质结的微观形态对改善激子/电荷行为及光伏效率至关重要。同时，活性层溶液法制备过程中，体相内不可避免地产生部分亚稳态区域。OSC长期工作过程中，给受体界面小分子受体会自发进行扩散再聚集，从而破坏两相分离，影响电荷传输并导致OSC性能下降。因此，抑制亚稳态区域的形成，对改善OSC的稳定性、获得长效运行的光伏电池具有重要作用。

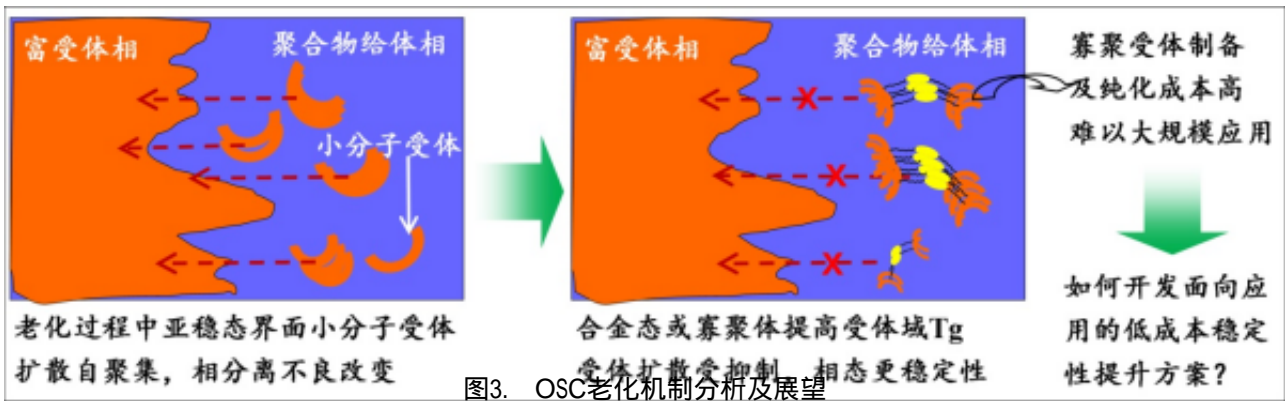
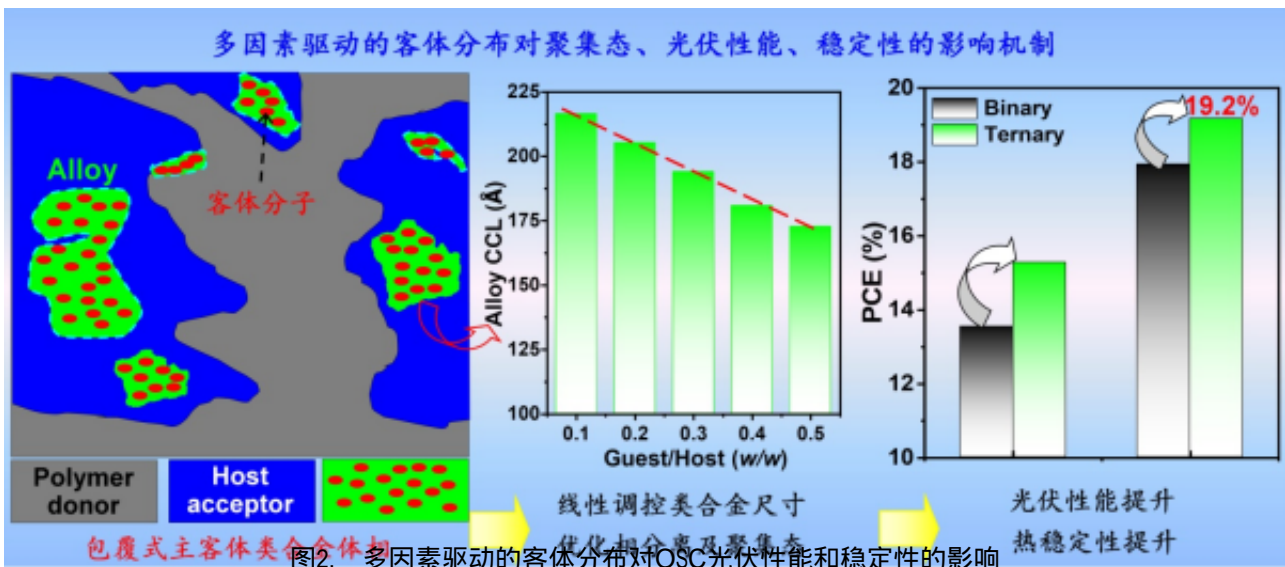
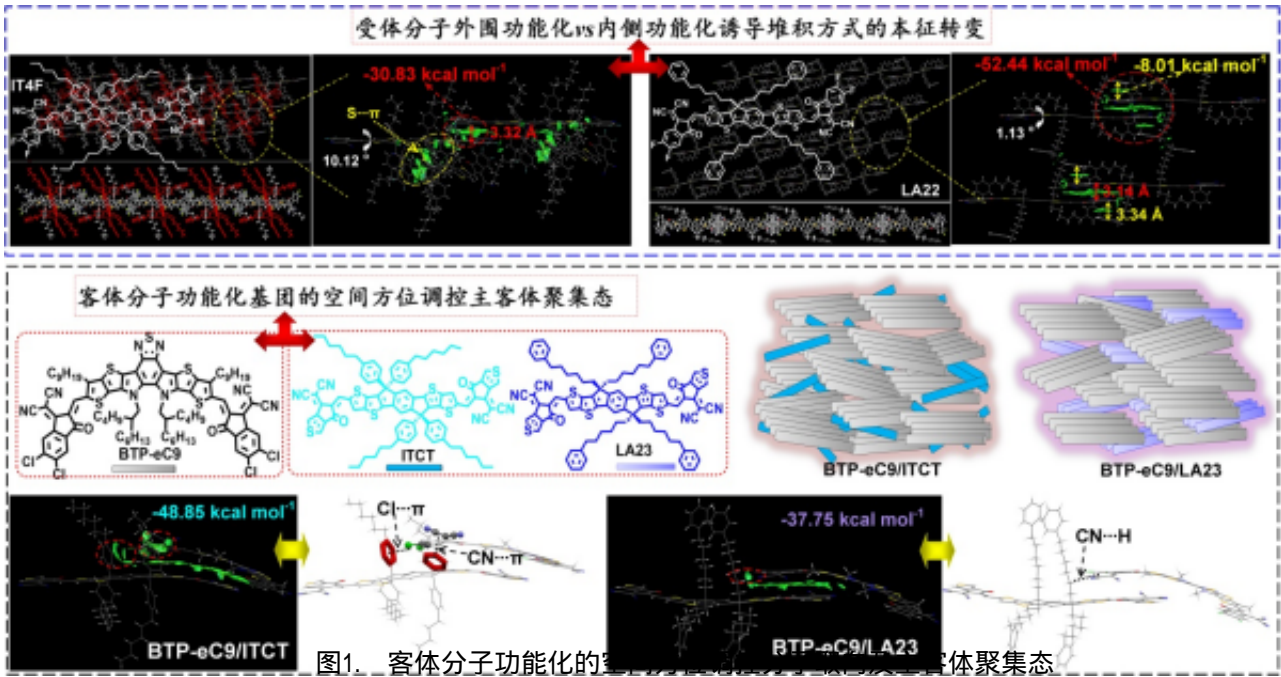
中国科学院青岛生物能源与过程研究所研究员包西昌带领的先进有机功能材料与器件研究组，从第三组分掺杂出发，采用分子外围功能化方案，在OSC的相态调控、稳定性提升及高效率制备等方面取得了一系列进展。相关成果相继发表在《先进材料》（Advanced Materials）上。

该研究优化受体分子侧链功能基团的位置（图1），将face-to-face/face-to-edge混合取向堆积的客体分子转换为100% face-to-face优势取向，提高了垂直方向的电子传输性能。单晶解析和相关理论分析发现，侧链外围功能化的分子可以通过外围共轭平台与相邻受体分子骨架形成紧密的 π - π 相互作用，使分子取向实现定向锚定。而相对于功能化基团在内侧的客体分子，外围功能化的客体与主体受体之间形成类合金聚集态，呈现出更为规整的分子排列与取向，降低了受体相内的缺陷密度及复合损失。掺杂后的OSC光伏效率达到19.12%，且类合金体相在热力学上更趋向于平衡态，OSC的热稳定性得到明显提升。因此，调控掺杂客体分子的堆积取向及主客体相互作用，对获得合适相分离、抑制亚稳态生成、提升光伏电池稳定性具有积极作用。

进一步，研究对外围功能化的客体分子主骨架进行再调控，获得了高质量的类合金体相，同时，类合金聚集体的晶域尺寸可以通过客体掺杂比例进行线性调控（图2）。相比受体相内同时存在客体自聚集区域及类合金区域，该研究中客体分子与主体受体具有高度兼容性。实验结果分析显示几乎所有的客体分子均参与类合金体相的构建，这是类合金晶域尺寸可以线性调控的本质原因。同时，客体分子掺杂后，无论是主体聚合物给体还是主体受体的结晶性均得到增强，促进了垂直方向空穴和电子的传输。此外，客体分子形成的类合金聚集态均包覆在主体受体相内，形成了核壳结构（主体包覆客体），增强了主客体之间的能量转移。对于这种独特的聚集态结构，研究首次提出了具有普适性的主客体结晶性、表面能、兼容性相互关系以及给受体相互作用四要素协同作用的驱动机制。此类独特的主客体聚集态及分子堆积，对于提高电荷传输、抑制电荷复合起到重要作用。研究将其作为客体分子进行掺杂，在多个体系中实现了超过80%的填充因子（最高达到81.1%）和19.2%的高能量转换效率。除了效率提升外，研究再次发现类合金体相的形成明显改善OSC的稳定性，验证了类合金体相抑制亚稳态形成、提高光伏电池稳定性的作用。

基于上述研究，类合金体相提升稳定性的机制可归因于类合金晶域更为规整的分子堆积以及由此产生的更高玻璃化转变温度（ T_g ）。受体域 T_g 的提高可降低给受体界面小分子受体向聚合物给体相的扩散系数，保持活性层相分离的稳定。有报道，相对于单个小受体分子单元，构建寡聚物受体分子（如二聚体和三聚体等）可提升受体的 T_g 及OSC的热稳定性。例如，基于寡聚受体制备的OSC效率可达18%， T_{80} 达到35000小时（每天工作8小时计算，相当于稳定运行12年），可满足应用需求。然而，寡聚受体的合成和分离成本均较高。目前，研究组在开发更加廉价的寡聚受体制备方法，并在锚定OSC稳定性的本征提升，开发更适合大面积印刷工艺、低成本、易操作提高OSC稳定性的原位技术及方案（包括热稳定性、柔性电池的机械稳定性等），以发展高效稳定、更具应用前景的OSC。

研究工作得到国家自然科学基金委员会、山东能源研究院和中国科学院青年创新促进会等的支持。



原文地址: <http://www.china-nengyuan.com/tech/199860.html>