国家纳米中心在大面积有机光伏器件制备的成膜动力学研究中获进展

制备高性能的大面积有机光伏器件，是推动有机光伏走向产业化所必须解决的难题。目前，实验室制备的小面积有机光伏器件光电转换效率已接近20%，但囿于未有清晰成熟的成膜动力学指导，有机光伏器件在放大组件面积时面临着效率损失问题。

在前期研究中，中国科学院国家纳米科学中心研究员魏志祥和张建齐等发现，在大面积有机光伏器件的制备过程中，微小的分子结构变化导致剧烈的成膜过程变化。研究显示，在含卤溶剂氯仿中能够取得相似光电转化效率（~18%）的两个非富勒烯受体Qx-1和Qx-2，在邻二甲苯中却有巨大的反差（13.7 %
与0.65%），而两个分子在成膜的结晶时间上存在显著差异。

为了探究分子结构在大面积有机光伏器件制备的成膜动力学中的影响，该团队选择了三个烷基链存在细微区别的Y系列同系物分子（Y6、N3、L8-BO）与PM6共混，采用狭缝涂布法制备大面积有机光伏器件。该工作采用原位吸收光谱、原子力显微镜及掠入射广角X射线散射，并结合分子动力学模拟的结果解析成膜动力学机制。原位光谱表征表明三种结构相似的受体分子在成膜时吸收光谱演化趋势存在显著差异，呈现出“生长”和“移动”的二元模式（图1）。后续的多尺度结构分析表明，三种不同的分子呈现出不同的聚集形态特征，且分子堆积模式存在明显区别。从分子动力学中提取出的星型三聚体及其进一步组装形成的聚集体，其特征能够同时体现“生长”模式的吸收光谱演化以及符合掠入射广角X射线散射结果。基于以上实验和模拟结果，该研究提出了聚集控制的大面积有机光伏器件制备成膜动力学（图2）。动力学模型提出，分子烷基链与主骨架相互竞争导致分子聚集类型的变化，进而逐层级地决定有机光伏器件的活性层形貌及器件性能。聚集态的分布由分子结构本征决定，但可通过浓度、溶液温度和给体-
受体分子的相互作用进行调制，为有机光伏材料的分子设计及加工工艺调整提供了重要参考。

相关研究成果以Concretized structural evolution supported assembly-controlled film-forming kinetics in slot-die coated organic photovoltaics为题，发表在《自然-通讯》（Nature
Communications）上。研究工作得到国家自然科学基金和中国科学院战略性先导科技专项的支持。

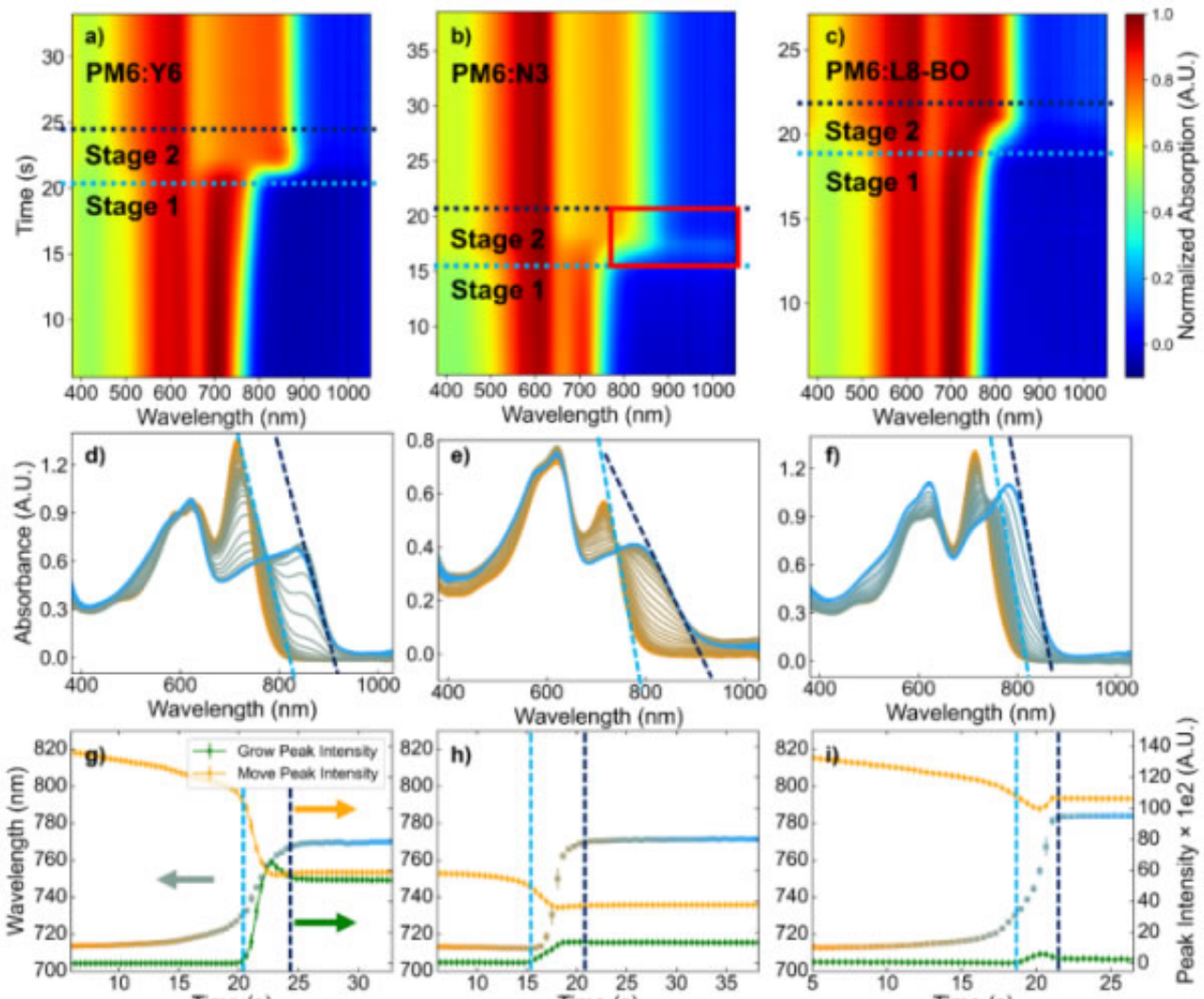

图1. 原位光谱表征结果。（a-c）原位光谱瀑布图；（d-f）光谱叠图；（g-i）生长-移动模型拟合光谱演化结果。

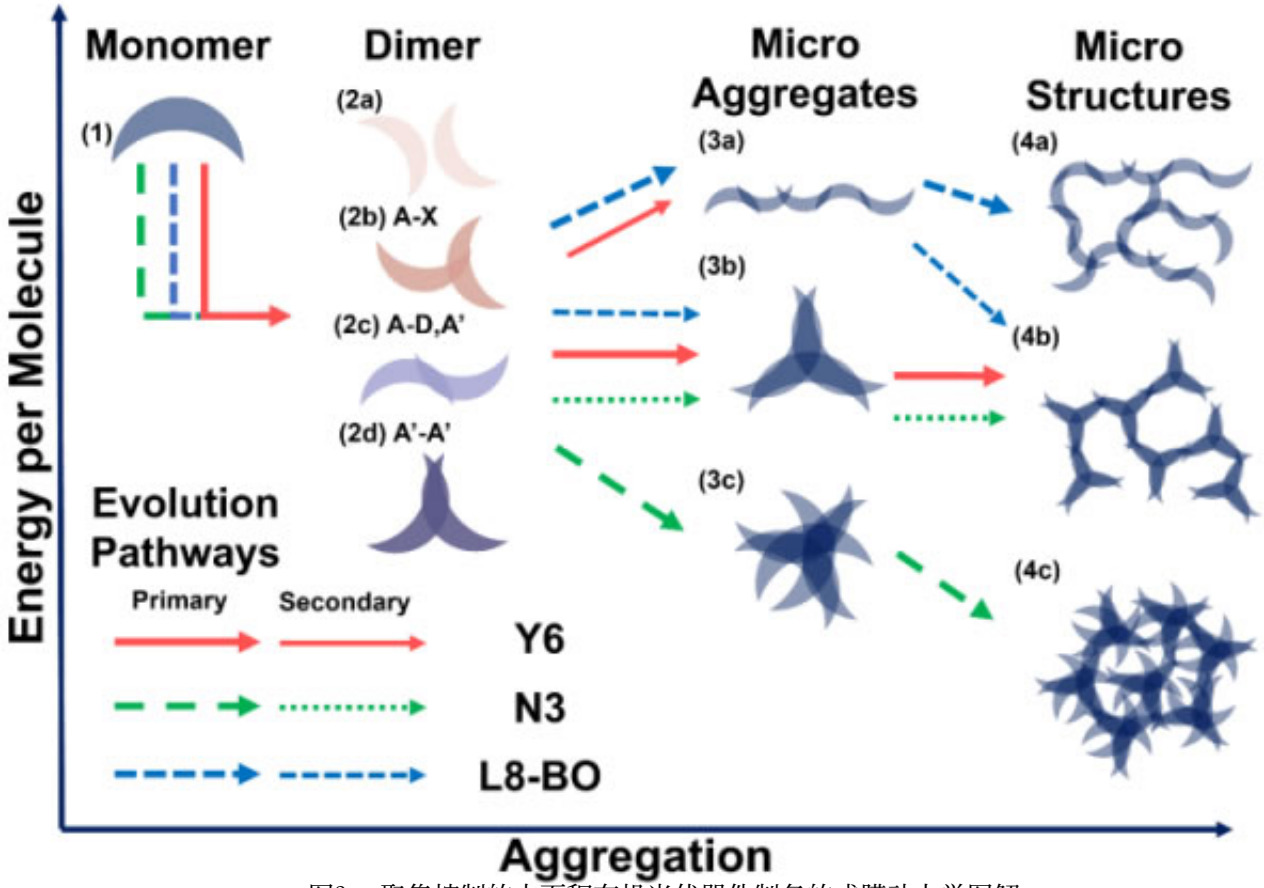

图2.　聚集控制的大面积有机光伏器件制备的成膜动力学图解

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/202394.html