宁波材料所揭示给体/受体界面性能对有机太阳能电池的影响

近几年来，有机太阳能电池（OSCs）在活性层材料设计、器件加工优化、稳定性提高等方面取得了发展，特别是功率转换效率已达到19%以上，为未来商业化应用提供了保障。Y系列非富勒烯受体的出现，有效提高了OSCs的光伏性能。其中，端基卤化策略（一般指氟化和氯化）被证实是调节受体光电性能简单有效的方法，但哪种更好的争论一直存在。

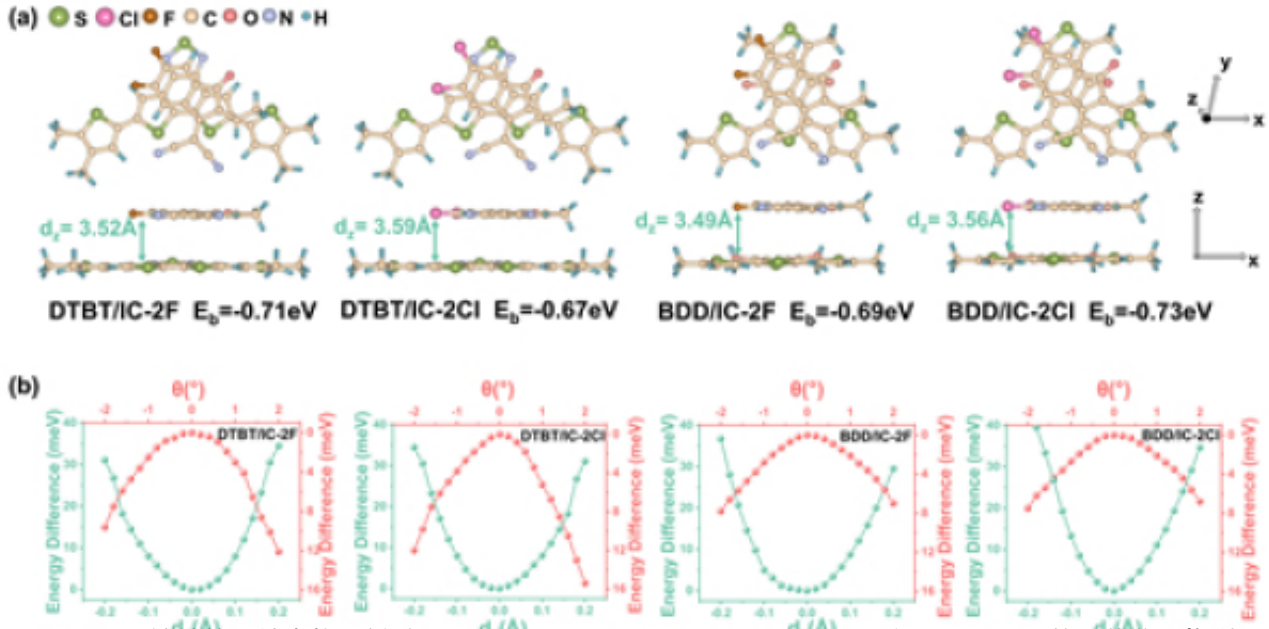
近日，中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员葛子义和刘权带领的有机光电材料与器件团队，合成了两种具有不同缺电子端基的新型受体分子——C9N3-4F和C9N3-4Cl，并分别与高分子主链具有不同缺电子基团（DTBT和BDD）的两个给体（D18和PM6）混合制备二元器件。详细的理论计算和界面结构形貌表征表明，受体的不同端基与给体缺电子基团之间具有不同的堆叠距离和结合能，导致给体/受体分子间混溶性存在差异，对相分离形貌、电荷输运行为和OSCs器件性能具有明显影响。

通过AFM、TEM和GIWAXS等形貌表征和激子电荷动力学研究表明，基于D18：C9N3-4F和PM6：C9N3-4Cl的共混膜具有精细的相分离形貌和优异的电荷传输性能，而基于D18：C9N3-4Cl的共混膜中分子过度聚集且双分子复合严重，基于PM6：C9N3-4F的共混膜中相分离尺寸过小，导致存在陷阱辅助分子复合。

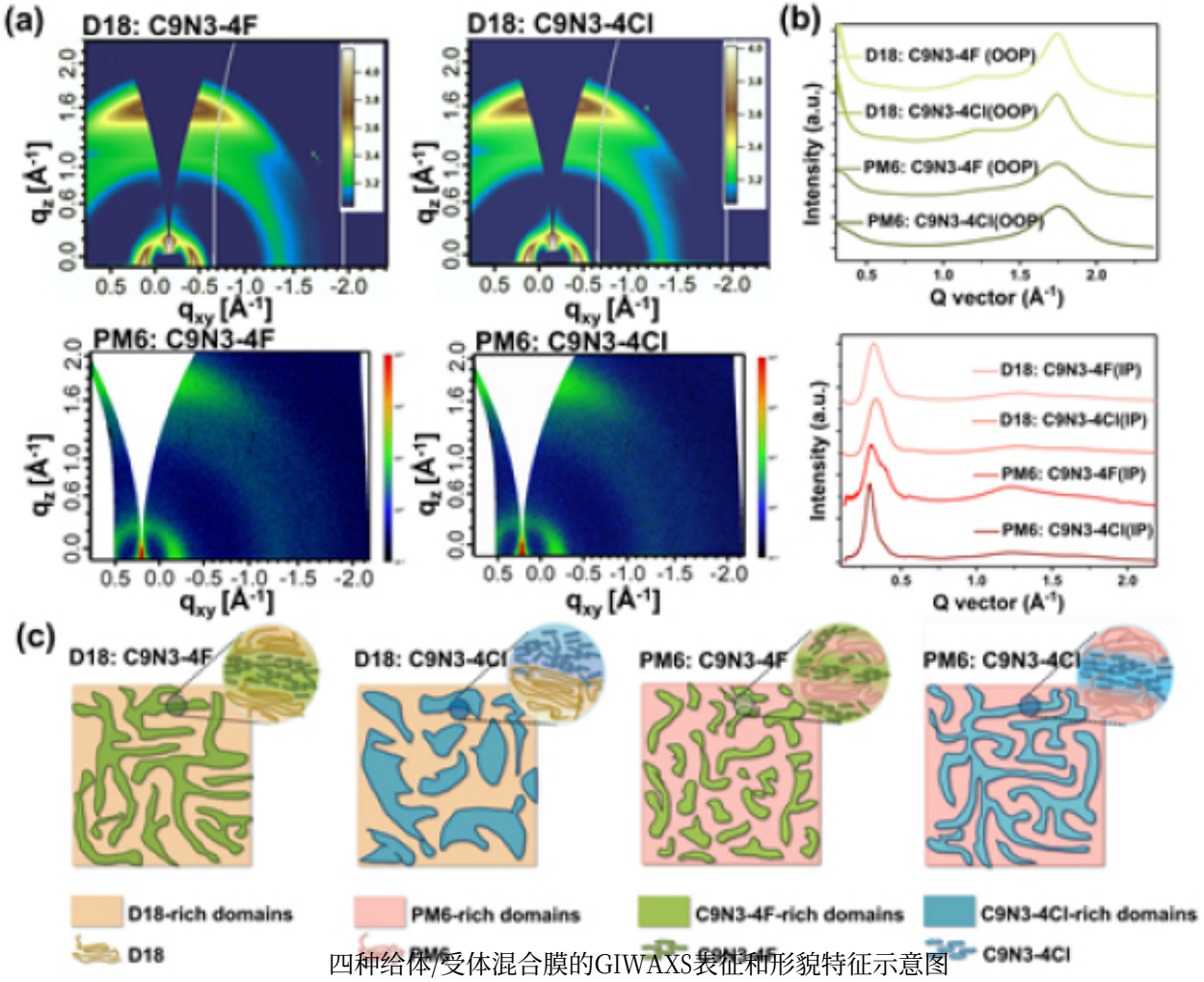
在经过其他三对已报道的具有相同共轭中心骨架但端基不同的受体分子验证后（Y6和Y7、Y6-BO和Y7-BO、AsymSSe-2F和AsymSSe-2Cl），研究得到一个普适性结论，即基于D18与氟化端基受体和PM6与氯化端基受体的这两类光伏器件普遍具有优异效率、高填充因子和良好稳定性。基于D18：C9N3-4F和PM6：C9N3-4Cl的二元器件效率分别达到18.53%和18.00%，且在85°C下存储500 h后仍可保持其初始电池效率的90%。

研究表明，简单评判受体分子氟化和氯化策略的优劣是不合理的，而选择合适的给体材料和调节给体/受体界面结构可以更大限度地呈现新型设计受体分子的光电转换能力，有益于未来高性能且稳定的有机太阳能电池的分子设计和材料选择。

相关研究成果以The Influence of Donor/Acceptor Interfaces on Organic Solar Cells Efficiency and Stability Revealed through Theoretical Calculations and Morphology Characterizations为题，发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金的支持。



DFT-D3理论计算：结合能最低时DTBT/IC-2F、DTBT/IC-2Cl、BDD/IC-2F和BDD/IC-2Cl的最优分子构型



四种给体/受体混合膜的GIWAXS表征和形貌特征示意图

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/207729.html