



## 亮点介绍

## 高性能有机稠环电子受体光伏材料

薛灵伟<sup>①②</sup>, 杨运旭<sup>①</sup>, 李永舫<sup>②\*</sup><sup>①</sup> 北京科技大学化学与生物工程学院, 北京 100083<sup>②</sup> 中国科学院化学研究所, 北京 100190

\*通讯作者, E-mail: liyf@iccas.ac.cn

收稿日期: 2016-06-07; 接受日期: 2016-06-07; 网络版发表日期: 2016-06-20

聚合物太阳能电池一般由氧化铟锡(ITO)透明正极、金属负极和夹在两电极之间的共混活性层所构成, 具有结构和制备过程简单、成本低、重量轻、可制备成柔性和半透明器件等突出优点, 近年来成为国内外研究热点. 活性层是聚合物太阳能电池最重要的组成部分, 通常由 p-型共轭聚合物给体和 n-型半导体受体材料组成. 富勒烯衍生物是最为广泛使用的 n-型受体材料. 然而, 富勒烯受体存在一些缺点, 如在可见区吸收弱, 电子能级很难调控, 在共混薄膜中易聚集从而影响形貌的稳定性和器件的寿命. 使用 n-型有机半导体材料作为受体材料, 可以克服富勒烯受体的缺点, 近年来受到研究者的关注. 然而早期非富勒烯聚合物太阳能电池的效率大大低于使用富勒烯受体的器件, 发展高性能的非富勒烯受体材料是有机太阳能电池领域的挑战性难题.

2015 年, 占肖卫课题组<sup>[1]</sup>通过巧妙的分子设计很好地解决了上述难题. 他们设计合成了一系列高性能的 A-D-A 型有机稠环电子受体材料. 例如, 以印

达省并二噻吩为核, 通过缩合反应在分子两端引入强拉电子单元, 合成了窄带隙 n-型有机半导体受体材料 ITIC (分子结构见图 1)<sup>[1]</sup>. 印达省单元的七并稠环共轭平面结构致使 ITIC 受体拥有很强的分子间 $\pi$ - $\pi$ 相互作用, 因而 ITIC 具有较高的摩尔吸收系数和高的电子迁移率; 同时, 这类 A-D-A 结构分子内强的推拉电子相互作用, 拓宽了材料的吸收光谱范围, 薄膜吸收边缘接近 800 nm, 增强了对太阳光的捕获; 另外, 由于印达省单元桥连原子上的 4 个取代基位于共轭平面之外, 能够有效地调制受体分子间的聚集; 更重要的是, 此类分子拥有较多的可裁剪位点(中心稠环, 末端吸电子基团、桥连原子), 因而其能级、吸收、聚集态可调空间较大. 在此基础上他们将桥连原子上的苯环用噻吩环取代, 得到了新的电子受体单元 ITIC-Th (图 1)<sup>[2]</sup>. 由于噻吩环的诱导作用, 相对于苯环取代的 ITIC ( $E_{\text{HOMO}}=-5.48$  eV,  $E_{\text{LUMO}}=-3.83$  eV), ITIC-Th 拥有更低的最高占有轨道(HOMO)和最低空轨道(LUMO)能级( $E_{\text{HOMO}}=-5.66$  eV,  $E_{\text{LUMO}}=-3.93$  eV),

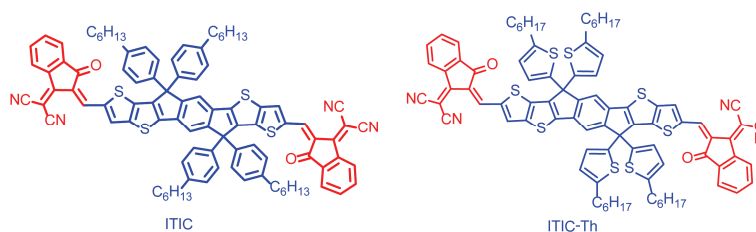


图 1 有机稠环电子受体材料结构图

引用格式: 薛灵伟, 杨运旭, 李永舫. 高性能有机稠环电子受体光伏材料. 中国科学: 化学, 2016, 46: 623-624

较低的 HOMO 能级有利于 ITIC-Th 与一些低 HOMO 能级的宽带隙的聚合物给体匹配. 另外, 相对于 ITIC ( $2.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ), ITIC-Th 具有较高的电子迁移率 ( $2.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ), 这得益于分子间噻吩侧链中 S-S 的相互作用. 以中间带隙聚合物 PDBT-T1 为给体, ITIC-Th 为受体, 非富勒烯聚合物太阳能电池的效率达到了 9.6%<sup>[2]</sup>. 目前, 占肖卫课题组报道的上

述受体材料已在商业销售, 国内外多个课题组使用多种中间带隙共轭聚合物给体与这些新型受体匹配制备了高效率聚合物太阳能电池, 其中单结电池效率最高可超过 11%. 这一效率值已达到和超过最好的基于富勒烯受体的器件, 充分说明了这些新型受体的广阔应用前景, 是具有重要国际影响力的明星受体材料.

---

## 参考文献

- 1 Lin YZ, Wang JY, Zhang ZG, Bai HT, Li YF, Zhu DB, Zhan XW. *Adv Mater*, 2015, 27: 1170–1174
- 2 Lin Y, Zhao F, He Q, Huo L, Wu Y, Parker TC, Ma W, Sun Y, Wang C, Zhu D, Heeger AJ, Marder SR, Zhan X. *J Am Chem Soc*, 2016, 138: 4955–4961