

青岛能源所揭示有机光伏活性层内的分子间相互作用协同机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15884.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近年来，有机光电材料和器件工艺不断创新，推动了有机太阳能电池事业的发展。然而，关于活性层内部复杂的分子间相互作用知之甚少。分子间相互作用机制的研究对调控活性层微结构和激子、电荷行为至关重要。A-D-A型小分子受体（SMA）因其独特的推拉电子结构而具有较强的分子内电荷转移（ICT）效应、易于调节的吸收范围和带隙及优异的平面性，有利于活性层形成良好的纳米互穿网络结构。SMA主要由 π 共轭骨架、侧链和缺电子端基组成。端基之间的 π - π 堆积为SMA排列提供了主要电荷传输通道，此外，在活性层端基与给体材料（D）之间存在分子间相互作用也已被证实。因此，利用端基工程调控受体分子间（A/A）及给受体分子间（D/A）相互作用对构建高效的有机光伏具有重要意义。

中国科学院青岛生物能源与过程研究所先进功能材料与器件研究组基于SMA侧链工程及分子间相互作用的研究（Adv. Mater. 2019, 31, 1807832；The Innovation 2021, 2, 100090；Adv. Funct. Mater. 2021, 30, 2007088），开展了活性层内分子间相互作用的协同研究。该研究将三种端基DCI、CPT CN和F-DCI分别引入甲氧基取代的引达省并二噻吩（IDT）共轭骨架，并引入丁基苯基（C4Ph）侧链调控其结晶性和共混性行为，合成了三种SMA（LA15、LA16和LA17，图1），并从D/A和A/A分子间相互作用的双重视角探究了其对光伏性能的影响。研究表明，不同的端基影响受体的结晶度和静电势（ESP）分布，进而调控A/A和D/A分子间的相互作用。虽然LA15表现出中等的结晶度A/A相互作用，但其合适的ESP分布诱导产生适中的D/A分子间相互作用，获得了13.10%的光伏效率。LA17由于异构体的存在表现出弱A/A相互作用，但其大的静电势诱导产生明显增强的D/A相互作用，从而产生了严重的电荷复合，效率低至12.07%。相反，高结晶度的LA16具有强A/A相互作用及适中的ESP分布带来相对较弱的D/A相互作用，二者协同作用获得了最优的BHJ形貌、电荷传输和最低复合损失，获得了最佳器件效率。

受体分子间A/A相互作用与材料分子堆积和结晶性密切相关，因而该研究中采用结晶性来定性评估A/A相互作用强度。而D/A相互作用通过ESP分布、Flory-Huggins相互作用参数（ χ ）及分子动力学分析（图2）。研究显示，BHJ的微观结构与光伏性能受A/A和D/A相互作用的共同影响，较强的A/A相互作用有利于增强分子堆积，形成优良的电荷传输通道，但过强的A/A相互作用会导致大聚集体的产生，增强激子复合。同时，过强的D/A相互作用易形成过度共混的形貌特征，增加电荷复合损失，适度的D/A相互作用有助于BHJ形成良好的纳米互穿网络结构和分子取向。因此，均衡的A/A和D/A相互作用可以改善太阳能电池的电荷传输及电荷复合损失，有利于构建高效的有机光伏体系（图3）。

近日，相关研究成果以Balancing Intermolecular Interactions between Acceptors and Donor/Acceptor for

Efficient Organic Photovoltaics为题，发表在Advanced Functional Materials

上。研究工作得到中科院青年创新促进会、国家自然科学基金、山东能源研究院等的资助。

[论文链接](#)

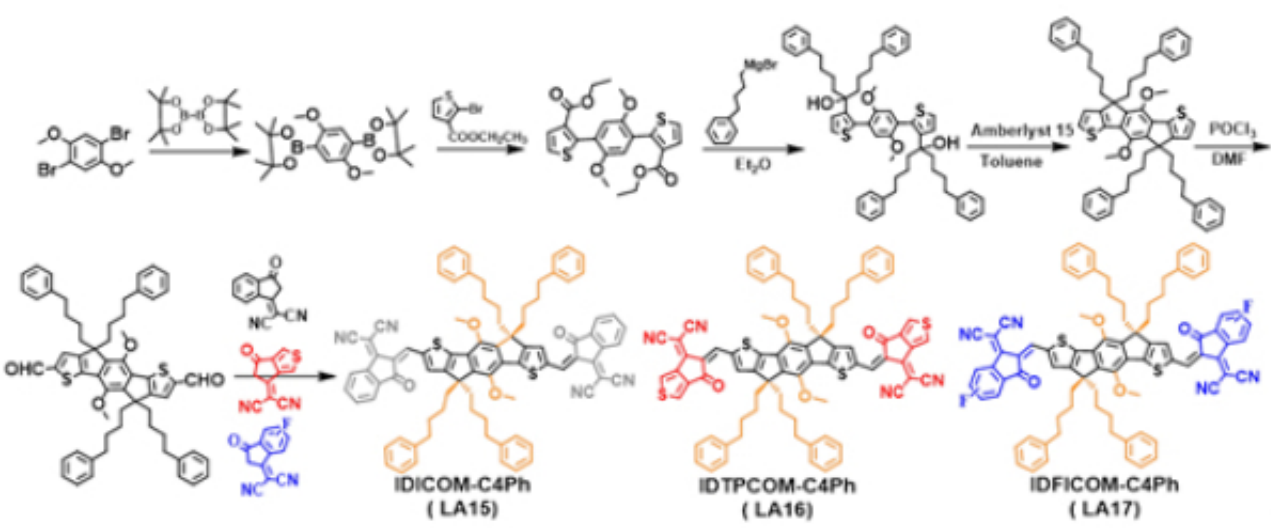


图1.小分子受体LA15-LA17的合成路线及结构式

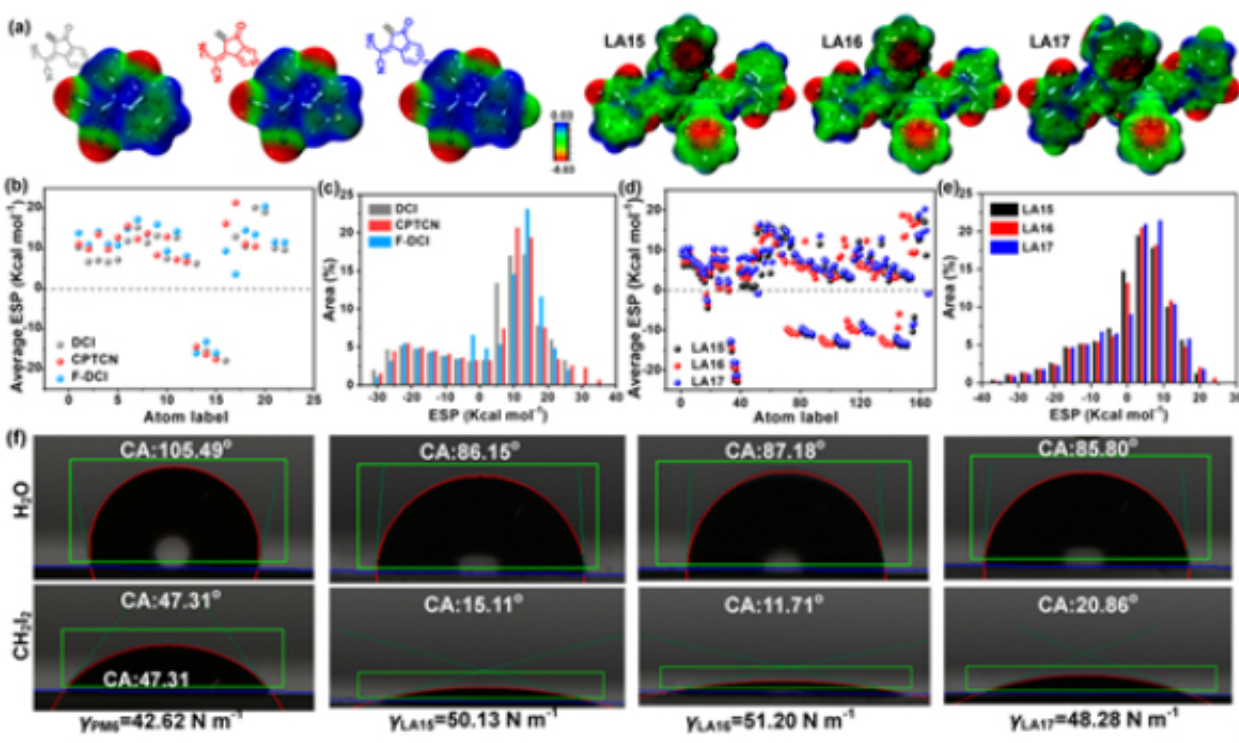


图2. (a) 端基与SMA的ESP图；(b、c) 端基中原子的平均ESP和ESP区域分布；(d、e) SMA中原子的平均ESP和ESP区域分布；(f) SMA薄膜接触角图

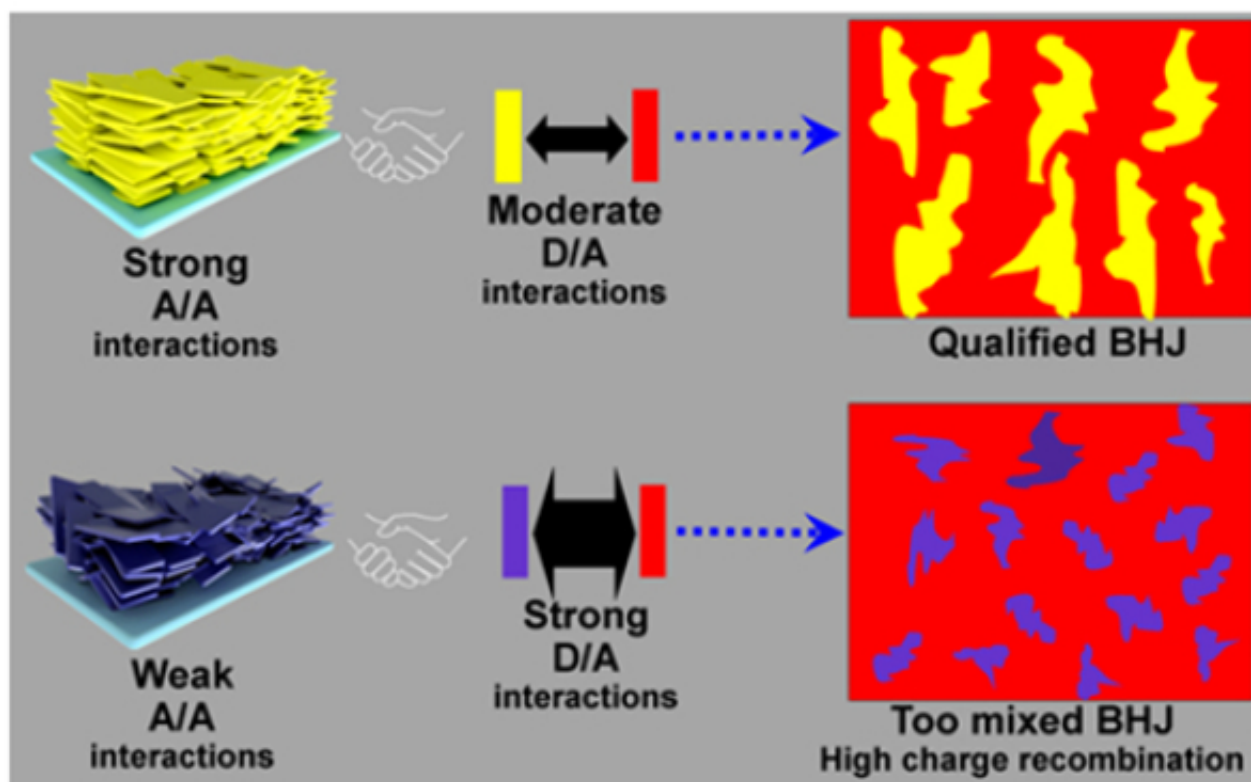


图3.分子间相互作用对BHJ形貌的影响示意图

研究团队单位：青岛生物能源与过程研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发