国家纳米中心等在降低有机太阳能电池能量损失方面获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/18844.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！

近日，中国科学院国家纳米科学中心纳米系统与多级次制造重点实验室研究员魏志祥、吕琨、朱凌云，与山东大学教授郝晓涛合作，设计合成了兼具低能量损失和高能量转换效率的非富勒烯小分子受体材料。结果表明，通过降低受体在光电转换过程中的重组能，可有效降低非辐射复合和驱动激子解离引起的能量损失，在开路电压（V_{OC}）高于0.93 V的情况下，效率可达18.2%，能量损失低至0.48 eV。这是迄今为止文献报道的效率超过17%的二元有机光伏体系中最小的能量损失。相关研究成果发表在《自然-通讯》（*Nature Communications*）上。

有机太阳能电池（OSCs）因重量轻、可溶液加工、半透明及柔性等优点而受到关注。随着材料设计的发展和器件工艺的优化，基于Y-体系的非富勒烯受体的OSCs的效率在二元器件中达18%以上，在三元器件中达19%以上。然而，与无机和钙钛矿太阳能电池相比，OSCs的能量损失（电压损失）相对较大，成为限制OSCs光伏性能的瓶颈因素。目前，大多数高性能OSCs的开路电压被限制在0.8~0.9 V，能量损失普遍大于0.5 eV。为了进一步提高OSCs的效率，需要深入了解能量损失的来源，并通过合理的分子设计进一步降低能量损失。

OSCs的能量损失主要来自两个方面：激子解离需要的驱动力和非辐射复合。非辐射复合与电子-振动耦合有关（即重组能λ，它描述了电子转移过程中分子几何形状的变化，反映了电子与分子内振动之间的相互作用）。重组能在OSCs的整个光电转换过程中具有重要作用，小的重组能有助于抑制非辐射符合，并可以减小激子解离所需的驱动力。近日，课题组以Y型非富勒烯受体为分子骨架，将苯并噻唑（BT）五元环核替换为喹喔啉（Qx）六元环核，设计合成了非富勒烯小分子受体Qx-1和Qx-2。通过理论计算与薄膜形貌、激子和电荷动力学结果表明，这两种受体在光电转换过程中的重组能比Y6显著降低，有利于提高激子寿命和扩散长度，促进电荷传输，抑制电荷复合带来的能量损失。以聚合物PM6为给体，Qx-1和Qx-2为受体的二元有机光伏体系的能量损失分别降低到0.508 eV和0.482 eV，且两种体系的V_{OC}均达到0.9 V以上，同时能量转换效率达18%以上。该工作揭示了减小重组能对于降低OSCs能量损失的重要性，为进一步提高OSCs的效率提供了新策略。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项、CAS-CSIRO联合项目的支持，并获得西安交通大学、北京师范大学的科研人员的帮助。

a）Y6、Qx-1和Qx-2受体的化学结构；b）光电转换过程中，不同电子态之间相互跃迁的重组能变化示意图；c）理论计算的三个受体中不同电子态之间相互跃迁的重组能；d）效率统计分布图

；e）不同体系能量损失与效率统计图。

研究团队单位：国家纳米科学中心

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转发