
香港城大实现高效有机太阳能电池的新机制调控

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/20804.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！

香港城大实现高效有机太阳能电池的新机制调控。北京时间2022年11月15日，香港城市大学的任广禹教授团队与南京大学张春峰教授团队合作在Nature Energy期刊上发表了一篇题为Suppressed recombination loss in organic photovoltaics adopting a planar – mixed heterojunction architecture的研究成果。

该成果报道了如何通过器件工程的物理方法实现同一材料体系中的三线态调控，从而抑制自由载流子的双分子复合损失，在提升光电流的同时又不牺牲光电压，实现了19%以上的光电转换效率。这一光生载流子动力学过程机制被超快光谱实验和分子动力学计算加以验证，揭示了有机太阳能电池中三线态激子与器件性能之间的关联，为进一步理解高性能有机太阳能电池的构效关系和效率优化策略提供了新的视角方向。论文通讯作者是任广禹、张春峰、Francis (Ray) Lin;第一作者是蒋奎、张杰、钟成。

自1980年第一例有机太阳能电池(OPVs)发明以后，以本体异质结结构(BHJ)为主导的OPVs实现了高速发展。近年来，两个明星分子ITIC和Y6的发现极大地推动了OPV光电转换效率的飞速提升。这些都说明了材料的开发决定了有机光伏的未来，而其背后物理工作机制也随着材料的变化不断完善和更新。

一直以来，在有机光伏中三线态激子(T1)的形成对有机光伏器件的性能有着显著的影响，但其背后的影响机制并不是特别清晰。2013年，英国科学家Richard Friend就提出了通过控制载流子波函数离域的方式来实现T1的抑制，并在2021年再次提出T1的改变直接与开路电压损失(Voc loss)有关。然而这些研究都是基于不同的材料体系，通过对比T1形成更少的材料体系来证明抑制T1的生成对于有机光伏性能的提升机制。因此，这里面一直有一个疑问：不同材料体系中，不同的材料具有不同的性质和性能是很正常的，比如T1的多少，光电压的改变，所以T1与光电压之间的直接关系不是很清晰，那么如何实现在同一材料体系下T1的调控以及是否能直接观察到T1与Voc的关系变化，始终没有过研究和验证。

近日，任广禹教授团队基于课题组前期在逐层沉积器件制备技术与材料性能关系上的新发现(Nat. Commun. 2021, 12, 468)，通过选择强聚集性质的给体聚合物D18配合Y6系列小分子受体，理论计算模拟分子间的相互作用行为，精确薄膜性质调控实现了超过19%的光电转换效率并在美国Newport光伏实验室进行了认证，同时与南京大学张春峰教授团队合作，通过超快光谱表征技术，分析了逐层沉积形成的平面混合异质结(PMHJ)与传统BHJ结构里面的激子和载流子动力学行为。该工作为理解高效PMHJ结构的有机太阳能电池工作机制提供了强有力支撑。

减少激子结合能有助于实现PMHJ微观结构的有机太阳能电池。通过理论计算和超快光谱分析，

课题组发现在给体聚合物和受体小分子中都存在一个离域的激子单线态(DSE)，这降低了实现电荷分离所需要克服的激子束缚能，同时，超快光谱表征证实受体小分子薄膜中的DSE可以跃迁至电荷分离态，即激子分离过程并非必须通过在给受体(D/A)界面处形成电荷转移态(CT)后才可实现，而这一机制保证了PMHJ晶体结构中D/A界面少的情况不会成为激子解离生成自由载流子的限制因素。

图1：激子转移机制和分子的超快光谱以及理论计算

同时，PMHJ微观结构可以抑制T1的生成。通过超快光谱观测，课题组发现在BHJ和PMHJ的晶体结构中都能看到T1的产生，但PMHJ结构明显表现出更弱的T1信号，更弱的T1信号意味着更少的自由载流子双分子复合，而这得益于PMHJ结构中更少的D/A接触面积，从而限制了受体中光生电子和给体中光生空穴在D/A界面处的相遇重组激子的几率。

PMHJ结构实现高电流高效率OPVs。由于PMHJ结构抑制了光生载流子的双分子复合损失，因此其可以实现更快的载流子转移和更高的光生载流子浓度，从而有效提升短路电流(J_{sc})。这与器件结果完美吻合，同时还发现在相同材料体系的BHJ和PMHJ器件中的 V_{oc} 几乎一致，这说明在D18和Y6系列给受体材料组合中并未观察到T1的形成或抑制与 V_{oc} 之间的直接关联。这给我们提供了一个全新的视野去理解T1与 V_{oc} 之间的机制，为进一步减少 V_{oc} 和 J_{sc} 之间的平衡协调实现更高能量转换效率提供了思路。

图3：器件性能与光电压损失分析

(来源：科学网)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41560-022-01138-y>

作者：任广禹等 来源：《自然-能源》

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