高性能有机光伏器件的三线态复合抑制研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/20885.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！

高性能有机光伏器件的三线态复合抑制研究获进展
。11月14日，中国科学院深圳先进技术研究院先进材料科学与工程研究所光子信息与能源材料研

*NatureEnergy*上，发表了题为*Suppressed recombination loss in organicphotovoltaics adopting a planar – mixedheterojunction architecture*的研究论文。

该工作使用瞬态吸收光谱（TAS）和分子动力学计算，验证了不同器件架构下，有机光伏器件中的光生载流子和激发态的动力学过程，首次证实了器件工程方法可实现同一材料体系中的三线态激子（T1）调控，在不损失开路电压（V_{OC}）的情况下有效提升了短路电流（J_{SC}），进而突破传统有机光伏器件中的电压-电流平衡限制，实现了19%以上的光电转换效率。该研究揭示了有机光伏器件中T1与器件性能之间的关联，为进一步剖析高性能有机光伏器件的构效关系和效率优化策略提供了新的视角方向。

有机太阳能电池是可溶液低温制备、兼容柔性卷对卷制备工艺以及透过光谱可调节的新一代薄膜光伏技术，在分布式光伏、建筑光伏和农业光伏等应用场景具有重要的应用价值。然而，有机太阳能电池较低的光电转换效率（PCE）是当前阻碍其进一步发展的瓶颈。受益于近年来聚合物给体和非富勒烯受体材料的发展，尤其是ITIC和Y6两个明星分子的发现，有机太阳能电池PCE迎来了飞速发展。当前，如何使单结有机光伏器件PCE突破20%是有机光伏领域关注的重点研究方向。

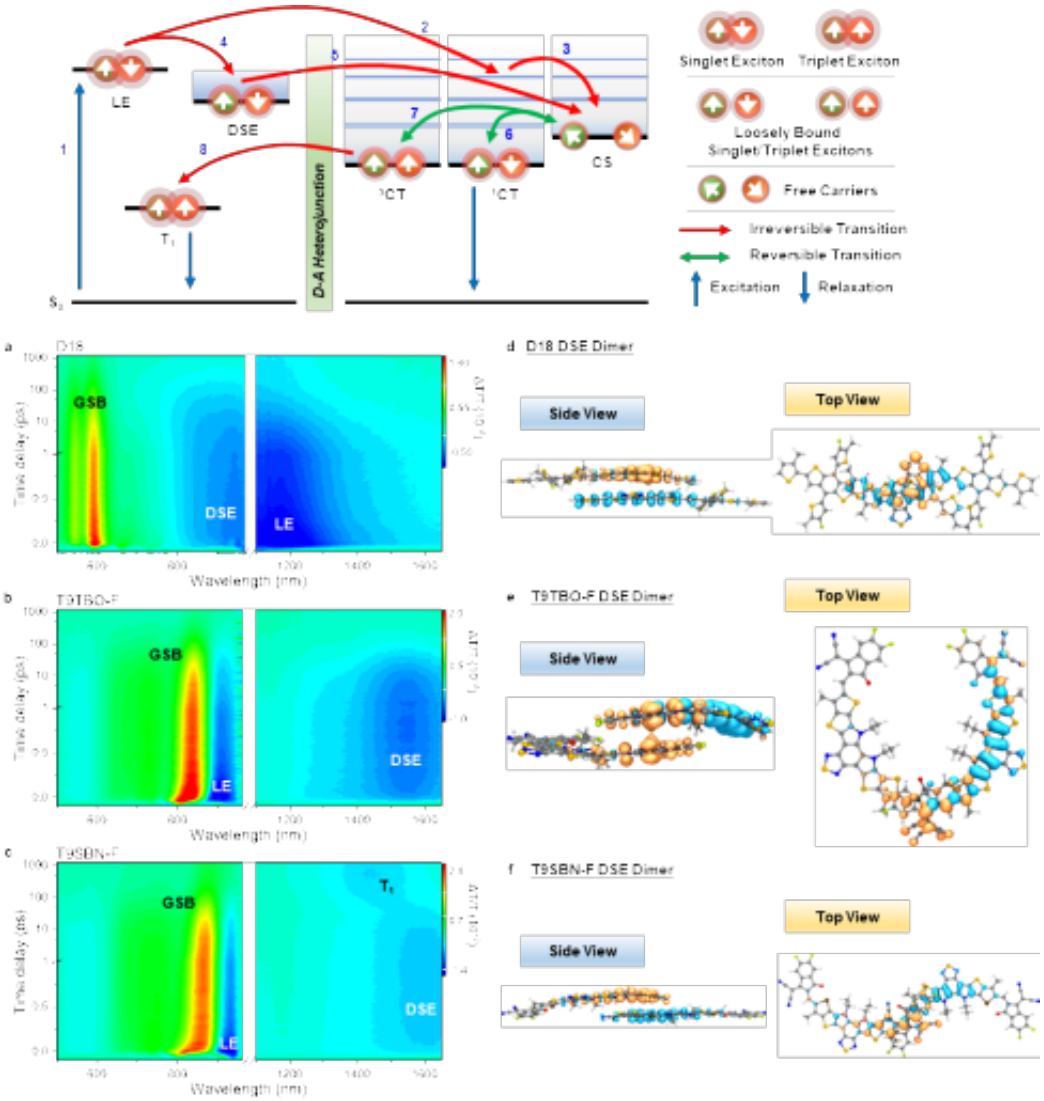
有机光伏器件中的T1被认为可显著影响器件性能，因此，T1的调控机制以及其与器件性能的关联是进一步提升有机光伏器件性能的关键科学问题。科学家通常使用分子工程对给受体材料改性，调控薄膜材料中的波函数和激发态能级等方式调控T1，并认为T1与V_{OC}相关联。而相关工作基于不同的材料体系，研究对比不同材料体系中的T1信号强度和器件V_{OC}大小，而器件V_{OC}受各自材料体系中的多种因素影响，因此T1的调控机制以及T1与器件性能的直接关联尚不清晰。

基于上述考虑，研究团队在同一材料体系中通过将器件架构由传统的体相异质结（BHJ）变为平面混合异质结（PMHJ），运用TAS表征技术证实器件架构的变化可显著影响T1的形成。科研团队应用分子动力学和TAS等方法发现，D18聚合物以及Y6系列小分子薄膜中在受激发后局域激发态激子（LE）均会快速转变为一个激子束缚能更低的离域激子单线态（DSE），且该DSE可直接跃迁至电荷分离态以产生光生自由电子/空穴，即激子解离过程并非必须经过在给受体界面处形成电荷转移态（CT）。这一机制保证了PMHJ架构器件中较少的给受体界面不会成为激子解离的限制瓶颈。

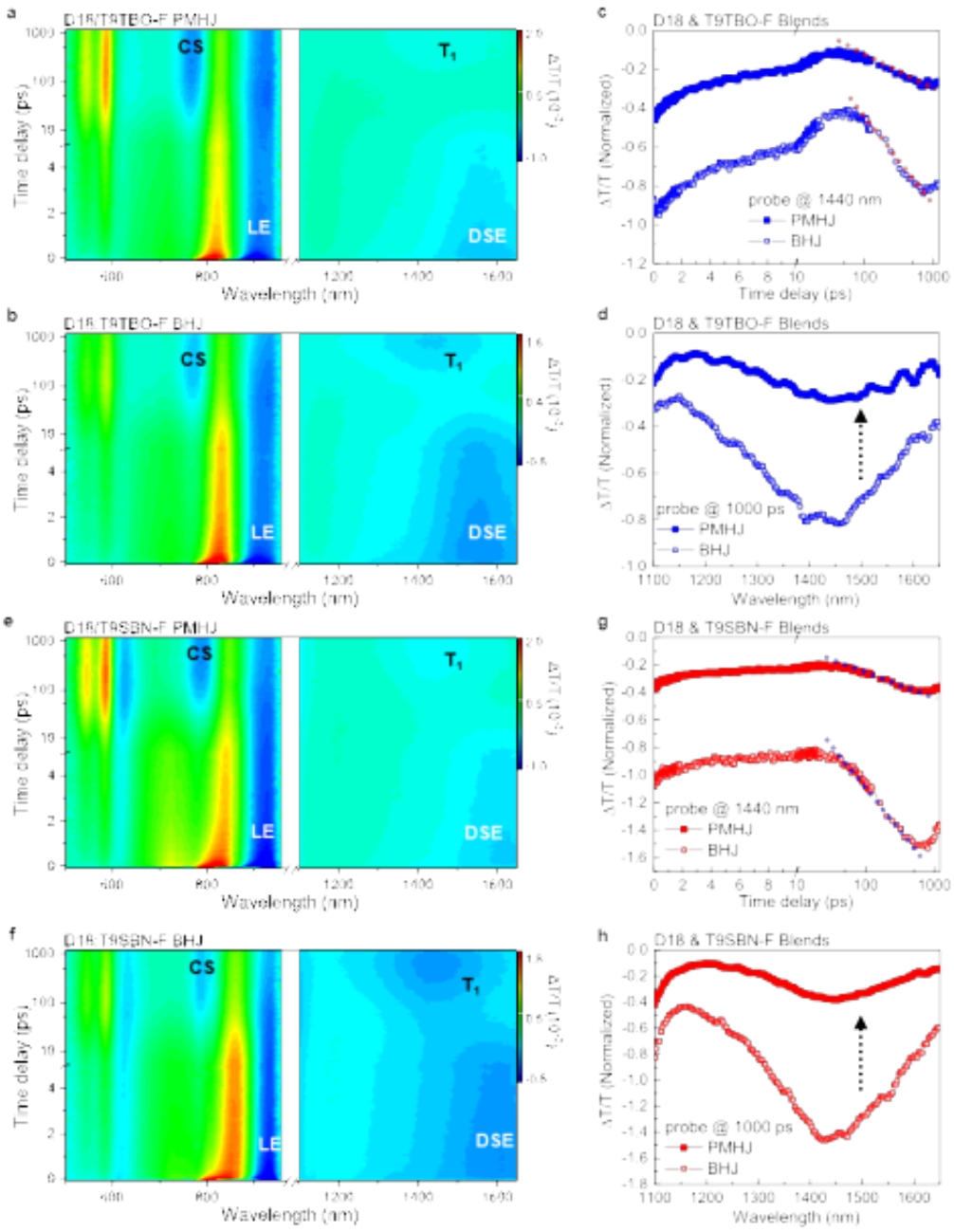
研究通过TAS测试发现，在PMHJ架构中的T1信号强度明显弱于BHJ架构的同时，自由载流子的激发态吸收信号（CS）有显著增强，这显示在PMHJ架构中产生了更多的自由光生载流子。TAS测试的动力学结果显示T1产生于CS的生成之后，这表明PMHJ和BHJ器件中的T1来源于自由光生载流子在给受体界面处的双分子复合行为。因此，PMHJ架构中较少的给受体接触面积可有效地降低受体中光生电子和给体中光生空穴在给受体界面处相遇发生双分子复合的几率，即在有机光伏器件的激发态演化过程中，由CS跃迁回^{3}CT/^{1}
CT这一载流子损失过程可以由器件工程进行有效阻断。

研究提出，与TAS实验显示出的更低光生载流子双分子复合几率和更高光生载流子数量结果相一致，采用PMHJ架构的器件表现出比BHJ器件
更高的J_{SC}，同时，PMHJ和PMHJ具有几乎相同的V_{OC}，这表明PMHJ器件具有更好的电压-电流平衡，
同时，在D18和Y6系列
给受体材料体系中并未观察到T1的形成或抑制
与V_{OC}之间的直接关联。这一工作为进一步探索T1与器件性能之间的机制以及进一步减少电压-电流平衡限制实现更高能量转换效率提供了新思路。

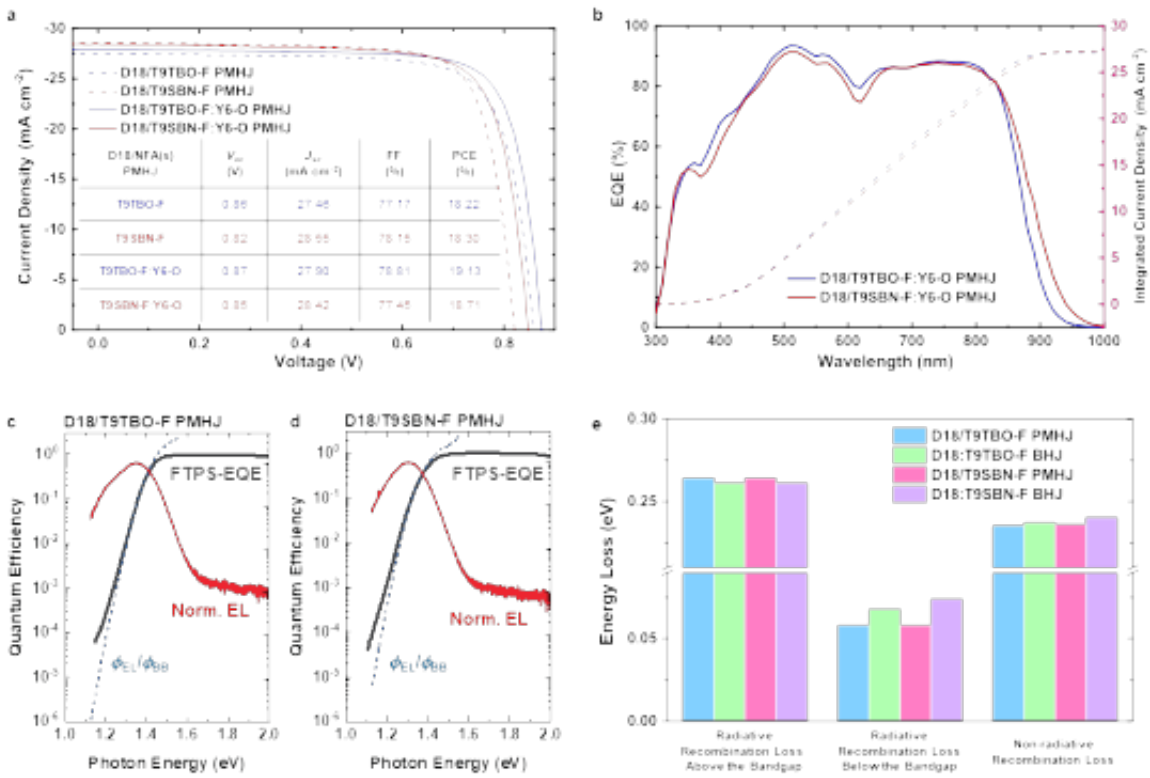
研究工作得到国家自然科学基金、科技部、广东省科技厅、深圳市科技创新委员会、香港创新科技署、香港研究资助局等的支持。



有机光伏器件中的激发态演化过程示意图和给受体分子的TAS以及理论计算结果



平面混合异质结和体相异质结中的T1等激发态动力学过程



器件性能与光电压损失分析

研究团队单位：深圳先进技术研究院

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