
研究揭示空穴传输材料的“聚集诱导自由基”机理

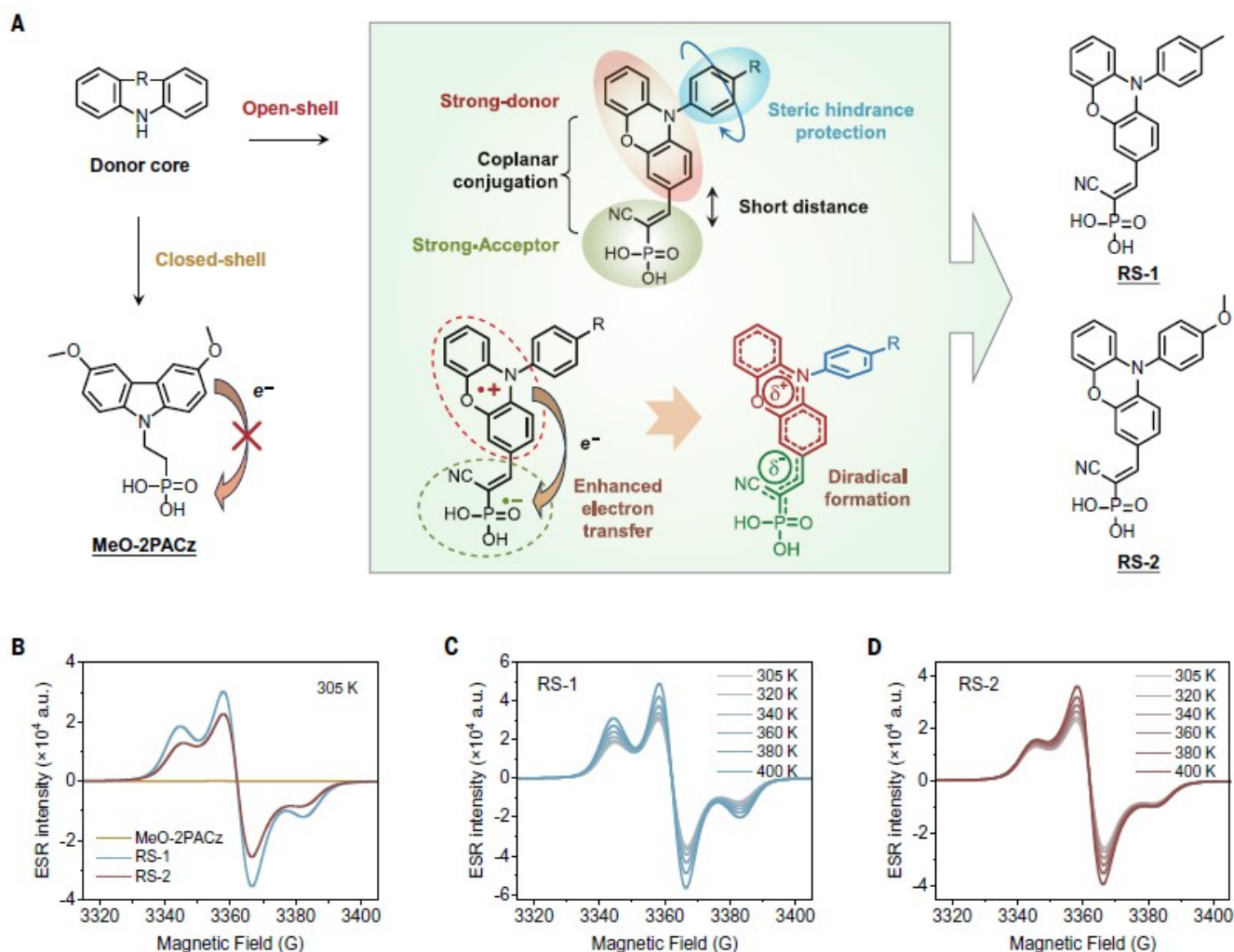
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34862.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！

研究揭示空穴传输材料的“聚集诱导自由基”机理。近日，华南理工大学材料科学与工程学院研究员李远团队与中国科学院长春应用化学研究所、中国科学技术大学、隆基绿能科技股份有限公司等合作，将经典的给体-受体型双自由基分子应用于钙钛矿太阳电池器件，实现了器件效率和稳定性的突破。相关成果发表于《科学》（Science）。

记者获悉，李远研究员作为论文共同第一作者，主要贡献为揭示了论文中的给体-受体自组装单分子层材料的开壳醌式-双自由基电子自旋基态，及其分子导电性与开壳-双自由基电子自旋基态的结构-性能关系。



给体-受体型双自由基自组装分子的设计思路与电子自旋共振谱图。研究团队供图

?

早在2017年，李远团队对经典给体-受体型有机半导体的闭壳-单线态基态提出了大胆而极富想象力的质疑。该团队进行了大量的实验和理论计算研究，提出并论证了给体-受体型有机半导体的开壳醌式-双自由基电子自旋基态的假设，并提出聚集诱导自由基机理。

据介绍，该重要发现和背后的聚集诱导自由基机理明显区别于1907年的Chichibabin自由基的恢复芳香性以稳定双自由基的古老机理。近八年，李远团队聚焦该研究方向，开发了一系列光、热及电化学稳定的给体-受体型有机自由基半导体，并探索了其在多领域的应用潜力。

最新研究中，中国科学院长春应用化学研究所研究员秦川江团队设计并合成出稳定的给体-受体型自组装分子（RS-1和RS-2）：以含氮杂环为电子给体，氰基磷酸为电子受体，利用短距离的强推拉电子作用增强了电子离域效应，在聚集态下促进了分子内和分子间的电荷转移，进而促进了醌式-双自由基及正负离子对共振式的形成。通过在分子的氮杂环上引入大位阻芳环，进一步提升了双自由基的光、热及电化学稳定性，利用电子自旋共振等测试手段证实了RS-1和RS-2具有本征的开壳-双自由基特性，同时展示出聚集诱导自由基效应及显著提高的导电性。

秦川江团队与隆基绿能科技股份有限公司合作，对材料进行了系统的器件测试，基于新型双自由基分子RS-2的4平方毫米小面积钙钛矿太阳电池的功率转换效率达26.3%，10.04平方厘米的组件效率高达23.6%。经NREL权威认证，1平方厘米钙钛矿-硅叠层太阳电池器件的效率高达34.2%，与同类报道相比具有明显优势。值得注意的是，在长期稳定性方面，基于RS-2的器件在45℃连续光照2000小时后仍保持97%的效率，即使在85℃高温及高湿条件下连续工作960小时，RS-2器件仍保持92%的效率。

该研究成果进一步验证了李远团队2017年提出的开壳醌式-双自由基电子自旋基态和聚集诱导自由基机理，为给体-受体型双自由基材料的应用提供了科研院校与企业合作研发的范例。同时，该工作展示了有机给体-受体型双自由基的应用潜力，表明聚集诱导自由基机理对未来有机光电材料、器件及相关物理机制的发展具有重要指导价值。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.adv4551>

作者：李远等 来源：《科学》

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