聚合物：富勒烯薄膜光伏衰减机制与稳定性提升研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/9047.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！

聚合物太阳能电池（PSCs）作为一种新型薄膜光伏电池，具有成本低、可溶液制备、毒性低、材料来源广等优点，被认为是很有前途的新型能源技术之一。要实现PSCs的真正商业化应用，需要满足三大条件：高效率、高稳定性和低成本。经过科学家的不懈努力，目前PSCs的最高效率已超过18%，已接近商业化应用要求。此外，聚合物太阳能电池的轻柔以及可大面积印刷制备等特点，可以大大地降低器件的制备成本。然而到目前为止，文献报道的大多数聚合物太阳能电池的寿命只有几个月，还远未达到实用化要求（10年），对聚合物太阳能电池衰减机理的理解也不够深入。

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所研究员马昌期联合太原理工大学博士闫翎鹏、教授杨永珍一同对聚合物:富勒烯薄膜光伏电池的衰减机理机制以及稳定性提升方法进行了系统的研究。该团队研究发现传统的P3HT:PC_{61}
BM太阳能电池的衰减过程中表现出明显的负载依赖性，即器件在开路条件下衰减最快，而在短路条件下衰减最慢（图1左），同时这一衰减过程具有一定的可逆性（图1右）。进一步的分析结果表明，该类光伏电池衰减的负载依赖性主要是由于外接负载的不同导致器件内部电势分布的差异，进而引发活
性层内光生高能激子浓度的不同
（图2），从而导致活性层中PC_{61}
BM激子二聚程度的不同。这一结果表明聚合物:富勒烯光伏电池体系中活性层内受光激发的高能激子的浓度是导致器件衰减的一个重要本征原因（*Journal of Materials Chemistry A*,2017, 5, 10010-10020）。

在前述工作的基础上，项目团队开发通过在活性层中引入哌嗪——一种富勒烯三重态的猝灭剂有效地抑制了P3HT:PC_{61}
BM器件的衰减行为，器件在持续光照1000小时内性能衰减不超过10%。实验的结果同时还表明，活性层内哌嗪掺杂还可以通过与PC_{61}
BM间的光诱导电子转移过程，进而提高活性层的电子迁移率，实现器件效率的提升。即哌嗪分子掺杂同时提高了电池的光电转换效率和稳定性（图3）。更为重要的是，哌嗪分子掺杂PTB7:PC_{61}BM，PTB7-Th:PC_{61}BM，PffBT4T-2OD:PC_{61}
BM等电池均同时提升了这几类电池的光电转换效率和稳定性，表现出优异的协同效应和很广的普适性（*Journal of Materials Chemistry A*, 2019, 7, 7099-7108）。

最近项目团队进一步比较了一系列N取代哌嗪衍生物在聚合物:富勒烯太阳能电池中的掺杂效果，

结果发现只有含N-H基团的掺杂剂可以有效提升器件的稳定性（图4）。他们通过实验测试分析以及量子化学计算理论模拟发现，哌
嗪中的N-H可以与$PC_{61}BM$中的C-O以及富勒烯球形成分子间氢键（图5），这一过程会拉近两分子距离，从而促进分子间的电荷转移过程
，抑制了PC_{61}
B
M
三重
态的产生
及二聚反应。与此
同时，计算模拟的结果表明，哌嗪掺
杂可以提升P3HT与PC_{61}
BM之间的电子转移过程，同时抑制光照下活性层中的能量转移过程（图6），从而在提升器件效率的同时提升了聚合物太阳能电池的稳定性（*ACS Applied Materials Interfaces,* 2020, DOI: 10.1021/acsami.9b23366）。该论文首次从分子层面理解了小分子掺杂剂对聚合物:富勒烯太阳能电池的掺杂作用机制，为其他新型稳定剂的寻找和探究提供了指导，同时也对PSCs的发展有很大意义。中国科学技术大学硕士研究生李泽睿为该文章第一作者，北京师范大学教授谭宏伟在理论计算方面给予了大力支持。

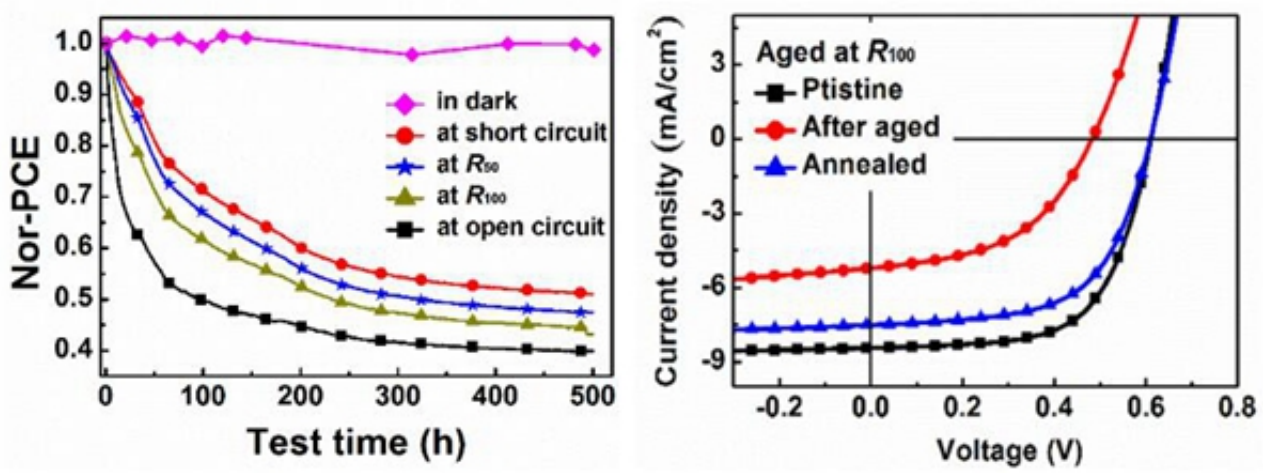


图1 聚合物:富勒烯太阳能电池衰减过程的负载依赖特性（左）及衰减过程的可逆性（右）

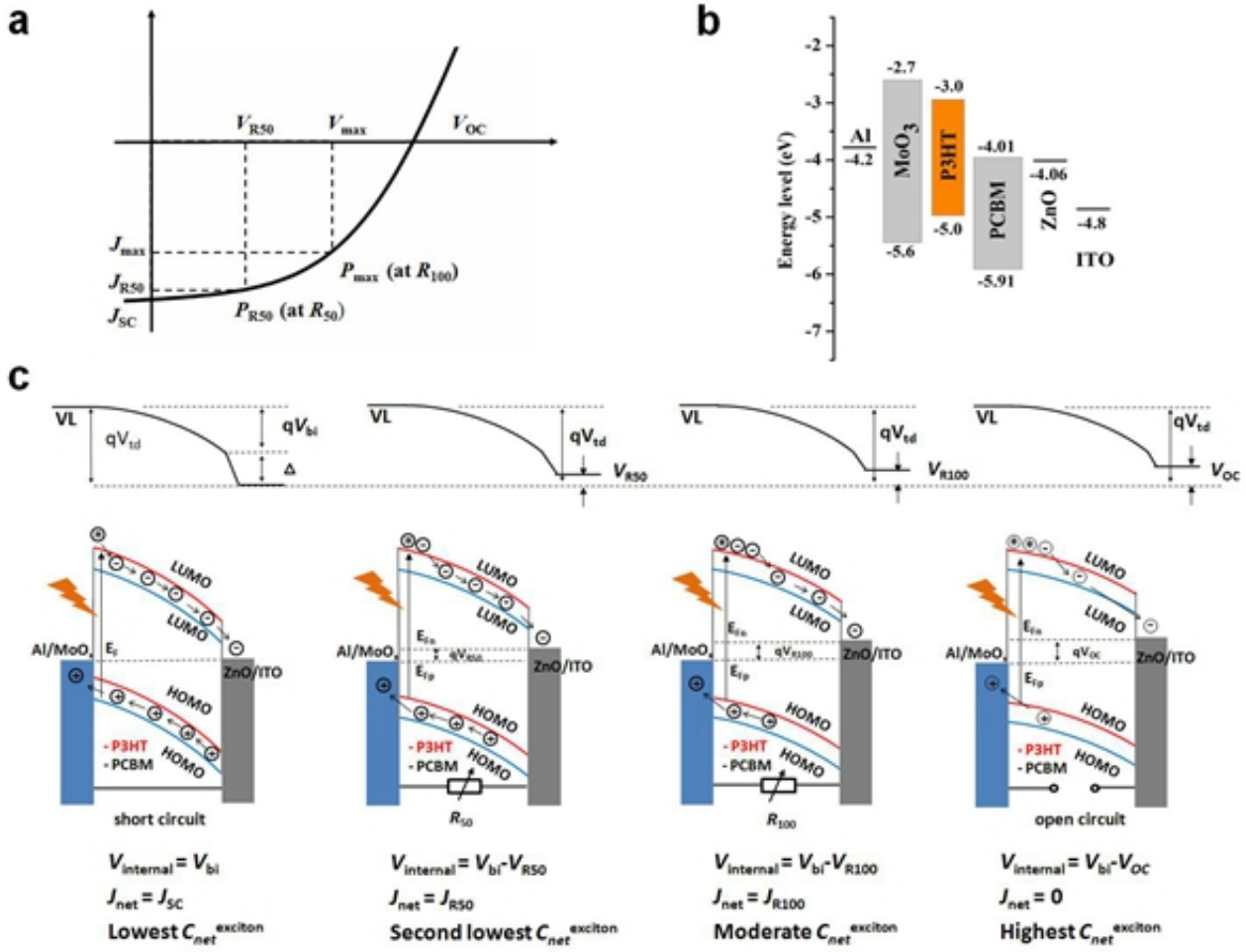


图2
结构为ITO/ZnO/P3HT:$PC_{61}BM$/MoO_x
/Al的太阳能电池在不同外接负载情况下工作时的能级图。(a) 太阳能电池在光照下的J-V曲线图, (b) 无光照时不同功能层的能级分布, (c)
持续光照下，在不同外接负载条件下的太阳能电池能级分布。

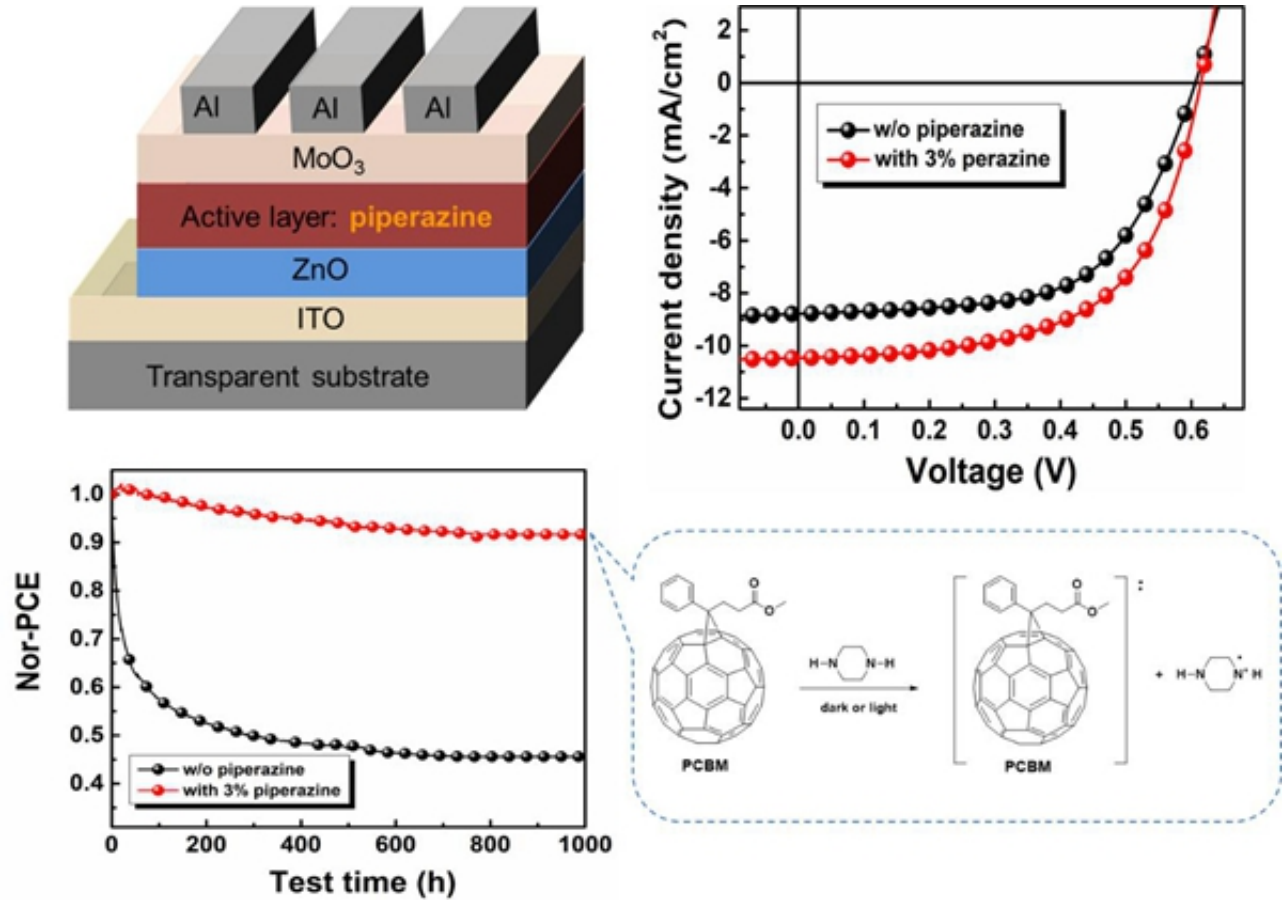


图3 哌嗪掺杂活性层同步提升聚合物薄膜电池的光电转换效率和稳定性

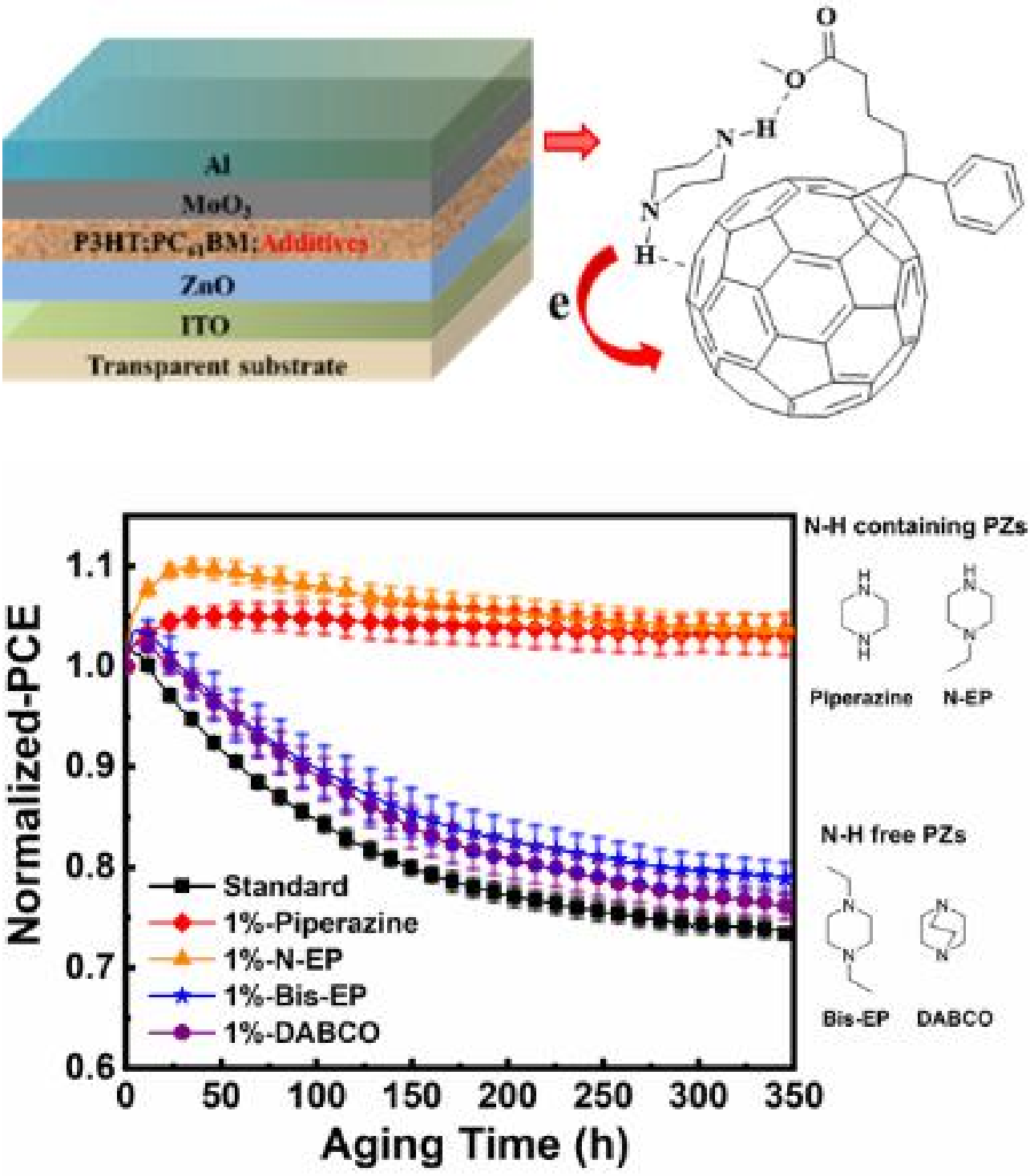


图4 哌嗪衍生物与$PC_{61}BM$作用稳定聚合物太阳能电池器件性能

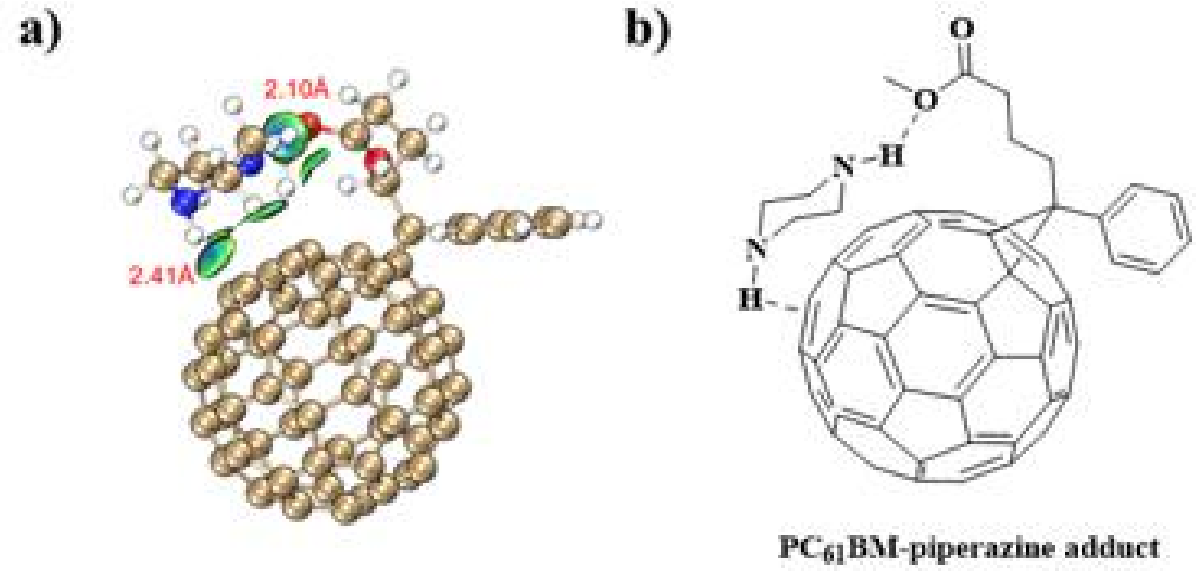


图5 哌嗪与$PC_{61}BM$分子间氢键示意图

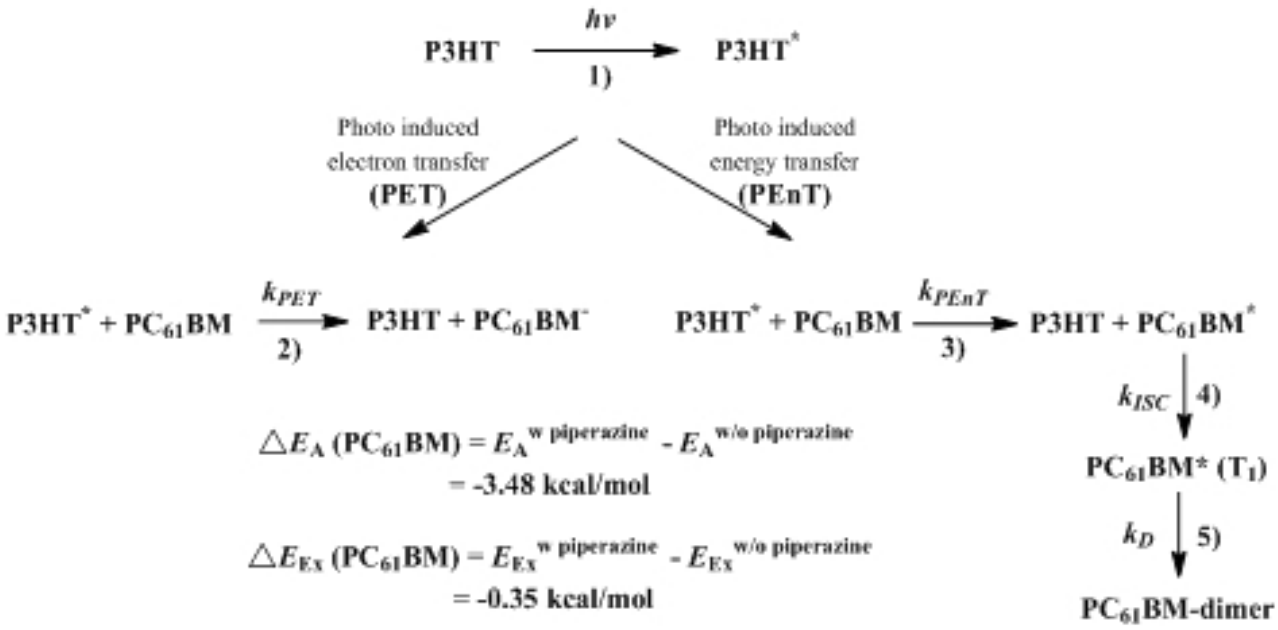


图6 哌嗪掺杂对活性层电荷转移/能量转移过程的影响

研究团队单位：苏州纳米技术与纳米仿生研究所

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转发