[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201804091

www.whxb.pku.edu.cn

全小分子非富勒烯有机太阳能电池效率突破 10%

刘忠范

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

The Efficiency of All Small Molecule Non-Fullerene Organic Solar Cells Reaching over 10%

LIU Zhongfan

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Email: zfliu@pku.edu.cn

(a) *p*-OS 小分子给体和 *n*-OS 小分子受体 IDIC 的分子结构; (b) 全小分子有机太阳能电池的器件结构;
(c) 基于各给体材料全小分子有机太阳能电池的能量转换效率(PCE)

有机太阳能电池由 *p*-型有机半导体(*p*-OS)给体和富勒烯衍生物或 *n*-型有机半导体(*n*-OS)受体共混活性层夹在透明导电电极和金属电极之间所组成, 具有结构简单、重量轻、成本低以及可采用溶液加工方法制备成柔性和半透明器件等优点, 成为了近年来新能源研究领域的研究热点。将传统有机太阳能电池使用的富勒烯衍生物受体用 *n*-OS 受体材料取代, 可以克服富勒烯受体存在的可见

光区吸光弱、能级调控困难和形貌稳定性差等缺点, 是提高有机太阳能电池光伏性能和稳定性的有效方法。

有机太阳能电池 *p*-OS 给体光伏材料包括共轭聚合物和有机小分子两类材料。与聚合物相比, 小分子材料具有确定的分子结构、无合成批次差别、易提纯等优点, 因此有机小分子给体光伏材料也引起了人们的广泛关注。全小分子非富勒烯有机

太阳电池使用 *p*-OS 小分子给体和非富勒烯 *n*-OS 小分子受体, 同时具有小分子给体材料和非富勒烯受体材料的优点, 最近成为有机太阳电池领域的一个重要研究方向。中国科学院化学研究所李永舫研究组最近在 *p*-OS 小分子给体材料和全小分子非富勒烯有机太阳电池的研究中取得系列研究进展¹⁻³, 使这类器件的能量转换效率突破了 10%。

p-OS 小分子给体材料多采用 A- π -D- π -A 型(其中 D 代表给体结构单元、A 代表受体结构单元)线性分子结构。他们首先在其开发的用于非富勒烯聚合物太阳电池的 J-系列高效聚合物给体光伏材料的基础上, 将 J-系列聚合物小分子化, 合成了基于苯并二噻吩(BDT)为给体单元、氟取代三氮唑(FBTA)为受体单元、乙腈脂基为末端受体单元的 *p*-OS 小分子 H11 和 H12 (分子结构见图 a)。以 H11 为给体、*n*-OS 小分子 IDIC 为受体的全小分子有机太阳电池开路电压(V_{oc})达到 0.977 V, 能量转换效率(下面简称效率)达到 9.73%¹。

非富勒烯 *n*-OS 受体材料具有各向异性的共轭骨架的特点, 因而优化 *p*-OS 的分子结构来调节全小分子活性层的形貌以形成良好的给体-受体纳米尺度相分离的互穿网络结构, 是提高全小分子非富勒烯有机太阳电池光伏性能的重要手段。他们以 BDT 为中心给体单元、将寡聚噻吩结构引入 *p*-OS 分子结构中, 合成了两个 *p*-OS 分子 SM1 和 SM2 (分子结构见图 a)。基于 SM1:IDIC 的全小分子有机太阳电池效率达到 10.11%², 这是全小

分子非富勒烯有机太阳电池效率首次突破 10%。

在基于噻吩取代 BDT 的二维共轭聚合物中, 硅烷基侧链可以有效地降低聚合物的 HOMO 能级, 增强吸收和提高空穴迁移率。为了进一步提升全小分子有机太阳电池的光伏性能, 他们最近又将硅烷基噻吩为侧链的二维 BDT 单元引入到 *p*-OS 小分子给体材料中, 合成了两个新的 *p*-OS 小分子给体光伏材料 H21 和 H22 (分子结构见图 a), 并研究了不同末端受体单元对材料物理化学性质及其光伏性能的影响。基于 H22:IDIC 的全小分子有机太阳电池的光电转换效率进一步提升到 10.29% (其中填充因子达到 71.15%, 开路电压为 0.942 V, 短路电流 15.38 mA·cm⁻²), 相关研究成果发表在近期的 *Advanced Materials* 上³。图中给出了这些 *p*-OS 小分子给体和 *n*-OS 小分子受体 IDIC 的分子结构、全小分子有机太阳电池的器件结构以及各给体材料的光伏能量转换效率。

References

- (1) Bin, H.; Yang, Y. K.; Zhang, Z. G.; Ye, L.; Ghasemi, M.; Chen, S.; Zhang, Y.; Zhang, C.; Sun, C.; Xue, L.; *et al. J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5085. doi: 10.1021/jacs.6b12826
- (2) Qiu, B.; Xue, L.; Yang, Y. K.; Bin, H.; Zhang, Y.; Zhang, C.; Xiao, M.; Park, K.; Morrison, W.; Zhang, Z. G.; *et al. Chem. Mater.* **2017**, *29*, 7543. doi: 10.1021/acs.chemmater.7b02536
- (3) Bin, H.; Yao, J.; Yang, Y. K.; Angunawela, I.; Sun, C.; Gao, L.; Ye, L.; Qiu, B.; Xue, L.; Zhu, C.; *et al. Adv. Mater.* **2018**, doi: 10.1002/adma.201706361.