[Recommendation]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201806041

www.whxb.pku.edu.cn

骨架非稠合的非富勒烯受体

占肖卫

北京大学工学院材料科学与工程系, 北京 100871

Simple Non-Fullerene Acceptors with Unfused Backbone

ZHAN Xiaowei

Department of Materials Science and Engineering, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Email: xwzhan@pku.edu.cn

相对于富勒烯类电子受体, 新型非富勒烯受体具有吸光能力强, 能级和结构可调等优点, 对于提升有机太阳能电池光电转换效率具有重要意义。近年, 基于稠环结构的电子受体(FREAs)受到了国内外研究者们最多的关注^{1,2}。这一类分子具有良好的骨架平面性, 高度离域的电子结构和强聚集倾向的末端基团有利于分子间的 π - π 堆积和电荷转移。另外, 基于FREAs体系的有机太阳能电池能量损失也可以低至0.4–0.5 eV³。基于以上稠环结构的设计策略, 科研人员设计并合成了许多稠环电子受体, 所制备的有机太阳能电池器件效率突破了14%⁴。

然而, 我们注意到FREAs骨架通过化学键链接, 往往需要涉及多步的化学反应, 合成成本偏高。并且目前各个课题组的研究方向更是在分子结构中并入了更多的芳环或者使用更复杂的稠环结构, 其合成的难度还会成倍增大^{5,6}。随着电池效率的不断提高, 简化分子结构, 降低合成成本对实现有机太阳能电池的规模应用具有重要的应用价值。浙江大学陈红征教授研究团队尝试简化FREAs的结构, 提出采用非稠合环核作为构筑单元, 利用分子内氢键构筑非富勒烯受体, 成功制备了效率超过11%的有机太阳能电池^{7,8}, 但其化学结构中仍包含了复杂的稠环结构。如何使用巧妙的化学设计来避免复杂的稠环结构的使用, 简化合成步骤, 并且保留FREAs的优势, 值得进一步研究。最近, 该团队进一步设计了一种结构简单的骨架非稠合的电子受体分子(ICTP), 中心骨架仅有一个苯环和两个噻吩环; 同时利用该团队之前掌

握的碳氢活化技术⁹, 简单高效地合成了目标产物, 并成功将其应用到了有机太阳能电池中。

该工作已在物理化学学报上在线发表(doi: 10.3866/PKU.WHXB201805091)¹⁰。该工作设计并合成了一种骨架非稠合的电子受体ICTP, 利用非共价作用力保持了分子的平面性, 实现了与FREAs类似的光电性质。ICTP结构简单, 整个合成通过碳氢键活化直接芳基化偶联反应, 仅需3步就可完成, 且每步的反应产率均在70%以上。ICTP的吸收光谱和能级结构特性使得其能够与许多高效的中等带隙聚合物给体搭配制备聚合物太阳能电池。该工作为未来高性能低成本非富勒烯受体分子的结构设计和合成提供了新的设计思路和重要的参考价值。

References

- (1) Lin, Y.; Wang, J.; Zhang, Z. G.; Bai, H.; Li, Y.; Zhu, D.; Zhan, X. *Adv. Mater.* **2015**, *27*, 1170. doi: 10.1002/adma.201404317
- (2) Lin, Y.; Zhang, Z. G.; Bai, H.; Wang, J.; Yao, Y.; Li, Y.; Zhu, D.; Zhan, X. *Energy Environ. Sci.* **2015**, *8*, 610. doi: 10.1039/c4ee03424d
- (3) Liu, J.; Chen, S.; Qian, D.; Gautam, B.; Yang, G.; Zhao, J.; Bergqvist, J.; Zhang, F.; Ma, W.; Ade, H. *Nat. Energy* **2016**, *1*, 16089. doi: 10.1038/nenergy.2016.89
- (4) Zhang, S.; Qin, Y.; Zhu, J.; Hou, J. *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1800868. doi: 10.1002/adma.201800868
- (5) Dai, S.; Zhao, F.; Zhang, Q.; Lau, T. K.; Li, T.; Liu, K.; Ling, Q.; Wang, C.; Lu, X.; You, W. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 1336. doi: 10.1021/jacs.6b12755
- (6) Liu, F.; Zhou, Z.; Zhang, C.; Zhang, J.; Hu, Q.; Vergote, T.; Liu, F.;

- Russell, T. P.; Zhu, X. *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1606574.
doi: 10.1002/adma.201606574
- (7) Li, S.; Zhan, L.; Liu, F.; Ren, J.; Shi, M.; Li, C. Z.; Russell, T. P.; Chen, H. *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1705208.
doi: 10.1002/adma.201705208
- (8) Li, S.; Zhan, L.; Zhao, W.; Zhang, S.; Ali, B.; Fu, Z.; Lau, T. K.; Lu, X.; Shi, M.; Li, C. Z.; Hou, J.; Chen, H. *J. Mater. Chem. A* **2018**,
doi: 10.1039/C8TA03753A
- (9) Liu, S. Y.; Shi, M. M.; Huang, J. C.; Jin, Z. N.; Hu, X. L.; Pan, J. Y.; Li, H. Y.; Jen, A. K. Y.; Chen, H. Z. *J. Mater. Chem. A* **2013**, *1*, 2795.
doi: 10.1039/c2ta01318e
- (10) Zhang, Z.; Zhang, S.; Liu, Z.; Zhang, Z.; Li, Y.; Li, C. Z.; Chen, H. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2019**, *35* (4), 394. [章中强, 张书华, 刘志玺, 张志国, 李永舫, 李昌治, 陈红征. 物理化学学报, **2019**, *35* (4), 394.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201805091