[Recommendation]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201806061

www.whxb.pku.edu.cn

利用非共价构象锁定设计小分子受体材料

庄林

武汉大学化学与分子科学学院, 武汉 430072

Designing Electron Acceptor via Noncovalently Conformational Locking

ZHUANG Lin

College of Chemistry and Molecular Sciences, Wuhan University, Wuhan 430072, P. R. China.

Email: lzhuang@whu.edu.cn

电子受体分子结构及太阳能电池电流密度-电压(J - V)曲线

聚合物太阳能电池(PSC)具有质轻,成本低,可通过溶液加工的方法大面积制备柔性器件等优点,受到广泛关注¹⁻³。目前,体异质结(BHJ)结构的PSC主要采用共轭高分子给体材料和受体材料共混制备光电活性层。2015年,占肖卫课题组首先报道了一类非富勒烯的高效率的稠环电子受体(FREAs)^{4,5}。这类受体具有化学结构易修饰,能级易调控以及跟给体聚合物吸收互补等显著优点,受到研究者的青睐。近3年来,基于FREAs构建的电池的效率不断被刷新,目前已经超过14%^{6,7}。

FREAs通常采用受体-给体-受体(A-D-A)型结构,受体材料的分子能级和吸收光谱主要通过对给体单元,受体单元以及给受体单元二者之间的联结方式的有效调控来实现。

北京师范大学薄志山、李翠红等人,在前期工作中,提出通过分子内的非共价作用设计受体材料可以简单有效地扩大受体分子的共轭长度,拓宽吸收光谱,增强电子传输,从而极大地提高了器件的光伏性能⁸。运用这种策略,他们合成了一种新的A-D-A型受体材料(ITOIC-2Cl),在给体单元和受体单元间引入3,4-二己氧基噻吩作桥。受体分子在溶液中具有较大的溶解度,而在薄膜中可以通过S $\cdots$ O和O $\cdots$ H等弱相互作用在分子内形成非共价键构象锁促进分子的平面性。此外,他们在端基上修饰成本低的Cl原子,通过增加端基的缺电子性增强分子内的电荷转移⁹。在两者的协同作用下,ITOIC-2Cl的光谱吸收拓宽到近红外区,有利于获得宽的光谱响应。基于该受体材料

的PSC, 实现了9.37%的光电转换效率, 其开路电压(V_{oc})为0.886 V, 短路电流(J_{sc})为17.09 mA·cm⁻², 填充因子(FF)为61.8%。以上实验结果已在物理化学学报上在线发表(doi: 10.3866/PKU.WHXB201805161)¹⁰, 该工作为我们提供了一种设计高效率的非富勒烯稠环电子受体的简单有效的策略。

References

- (1) Li, Y. F. *Acc. Chem. Res.* **2012**, 45 (5), 723. doi:10.1021/ar2002446
- (2) Yu, G.; Gao, J.; Hummelen, J. C.; Wudl, F.; Heeger, A. J. *Science* **1995**, 270 (5243), 1789. doi: 10.1126/science.270.5243.1789
- (3) Krebs, F. C. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **2009**, 93 (4), 393. doi: 10.1016/j.solmat.2008.12.008
- (4) Lin, Y. Z.; Zhang, Z. G.; Bai, H. T.; Wang, J. Y.; Yao, Y. H.; Li, Y. F.; Zhu, D. B.; Zhan, X. W. *Energy Environ. Sci.* **2015**, 8 (2), 610. doi: 10.1039/c4ee03424d
- (5) Lin, Y. Z.; Wang, J. Y.; Zhang, Z. G.; Bai, H. T.; Li, Y. F.; Zhu, D. B.; Zhan, X. W. *Adv. Mater.* **2015**, 27 (7), 1170. doi: 10.1002/adma.201404317
- (6) Zhang, S.; Qin, Y.; Zhu, J.; Hou, J. *Adv. Mater.* **2018**, in press. doi: 10.1002/adma.201800868
- (7) Li, S. S.; Ye, L.; Zhao, W. C.; Yan, H. P.; Yang, B.; Liu, D. L.; Li, W. N.; Ade, H.; Hou, J. H. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140 (23), 7159. doi: 10.1021/jacs.8b02695
- (8) Liu, Y. H.; Zhang, Z.; Feng, S. Y.; Li, M.; Wu, L. L.; Hou, R.; Xu, X. J.; Chen, X. B.; Bo, Z. S. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139 (9), 3356. doi: 10.1021/jacs.7b00566
- (9) Yao, H. F.; Cui, Y.; Yu, R. N.; Gao, B. W.; Zhang, H.; Hou, J. H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56 (11), 3045. doi: 10.1002/anie.201610944
- (10) Feng, S. Y.; Lu, H.; Liu, Z. K.; Liu, Y. H.; Li, C. H.; Bo, Z. S. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2019**, 35 (4), 355. [冯诗语, 路皓, 刘泽坤, 刘亚辉, 李翠红, 薄志山. 物理化学学报, **2019**, 35 (4), 355.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201805161