[Research Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB202001011

www.whxb.pku.edu.cn

全小分子有机太阳能电池：多级次形貌调控实现效率突破

李永舫

中国科学院化学研究所, 北京 100190

All-Small-Molecule Organic Solar Cells: Hierarchical Morphology Control Achieves Efficiency Breakthrough

Yongfang Li

Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P. R. China.

Email: liyf@iccas.ac.cn.

Published online: January 15, 2020.

a) ZR1, Y6, IDIC-4Cl 分子结构; b) ZR1:Y6 和 ZR1:IDIC-4Cl 的 $J-V$ 曲线; c) 相对应的 EQE 图谱;
d) 多级次形貌的 TEM 图; e) 不同退火条件下的共振软 X 射线散射图。

有机本体异质结(BHJ)太阳能电池由于其质轻和可大面积印刷柔性器件等优势而引起了广泛的关注。小分子给体具有分子量明确、易于纯化和批次差异小等优点。此外,小分子较强的结晶性可以获得更高的相纯度和更低的能量无序度,从而可制备高电荷迁移率、低能量损失的有机太阳能电池^{1,2}。尽管具有上述优点,全小分子有机太阳能电池到目前为止能量转化效率仍然低于对应的聚合物太阳能电池,其中最重要的挑战是如何控制

全小分子有机太阳能电池中的纳米互穿网络形貌。给体/受体互穿网络中高效传输通道的缺失将导致低的电荷载流子迁移率以及严重的电荷复合等问题。通过分子设计实现多级次形貌,为同时实现有效的电荷分离和传输、降低电荷复合提供了一种潜在的策略。

近日,国家纳米科学中心魏志祥、吕琨研究员课题组与西安交通大学马伟教授、瑞典林雪平大学高峰教授合作,以共轭扩展的富电子五元稠环

二噻吩并苯并二噻吩(DTBDT)为核的小分子ZR1为给体, 非富勒烯分子Y6为受体, 通过优化活性层的多级次形貌, 实现了效率14.34%的突破, 这是目前报道的全小分子有机太阳能电池的最高效率(相关分子结构和实验结果见上图)。相关研究已发表在近期的*Nature Communications*上³, 题目为 All-Small-Molecule Organic Solar Cells with Over 14% Efficiency by Optimizing Hierarchical Morphologies。

在该项研究中, 他们设计并合成了A- π -D- π -A型小分子给体ZR1, 其中共轭扩展的富电子五元稠环DTBDT作为给体(D)单元, 以有效地扩展共轭平面并改善分子的平面性; 选用了二噻吩作为 π 桥, 代替常用的三噻吩 π 桥, 以降低HOMO能级并增加分子的刚性, 实现了分子结晶性和活性层形貌的协同优化。研究表明, 通过引入共轭扩展稠环扩展共轭体系并改善分子的平面性, 提高了分子的结晶性; 进一步通过热退火诱导形成了优化的多级次相尺寸分布。较小的相区尺寸平均约10 nm, 有利于激子扩散和有效的电荷分离; 较大的相区平均约70 nm, 并与约100 nm长和30 nm宽的给体晶

体共存, 实现了有效的电荷传输。这种优化的多级次形貌表明, 多尺度的纳米结构以及共存的晶体是实现高性能的关键因素。同时, 器件能量损失的研究表明, ZR1:Y6体系具有较低的辐射复合能量损失和非辐射复合能量损失, 辐射复合能量损失低至0.04 eV, 从而有助于开路电压的提高。

该工作深入阐述了全小分子体系中分子设计、形貌调控与器件性能之间的内在关系, 对高效率有机光伏材料的设计具有重要的借鉴意义, 有助于实现全小分子有机太阳能电池效率的进一步提高。

References

- (1) Chen, Y.; Wan, X.; Long, G. *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 2645. doi: 10.1021/ar400088c
- (2) Li, H.; Wu, Q.; Zhou, R.; Shi, Y.; Yang, C.; Zhang, Y.; Zhang, J.; Zou, W.; Deng, D.; Lu, K.; Wei, Z. *Adv. Energy Mater.* **2019**, *9*, 1803175. doi: 10.1002/aenm.201803175
- (3) Zhou, R.; Jiang, Z.; Yang, C.; Yu, J.; Feng, J.; Adil, M. A.; Deng, D.; Zou, W.; Zhang, J.; Lu, K.; *et al.* *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 5393. doi: 10.1038/s41467-019-13292-1