非富勒烯有机光伏体系三线态损耗通道的分子氟化调控

占肖卫

北京大学材料科学与工程学院, 北京 100871

Fluorination Effects on Triplet Loss Channels in Nonfullerene Organic Photovoltaic Systems

Xiaowei Zhan

School of Materials Science and Engineering, Peking University, Beijing 100871, China.

Email: xwzhan@pku.edu.cn

Published online: April 19, 2021.

非富勒烯光伏系统三线态能级的受体氟化调控机制(a)。有机聚合物给体以及氟化和未氟化的非富勒烯受体分子结构(b)。在氟化受体所构成的体异质结结构中, 三线态产生被抑制(c), 自由电荷具有更长的寿命(d)。

有机太阳能电池受益于非富勒烯受体的发展, 能量转换效率已跃升至18%左右¹, 器件效率

的进一步提升决定于光电荷产生、输运和收集过程中的量子效率。光激发载流子的动力学过程的

研究, 不仅能阐述基本工作原理, 也为器件优化提供新思路。在有机给、受体共混体系中, 光激发单线态激子拆分成的电子空穴, 通过双分子复合有一定几率重新形成界面激子, 其中界面电荷转移三线态(^3CT)通过系统中能量较低的三线态复合, 该自旋相关的损耗通道是有机器件区别于无机器件的重要特征, 也是器件优化的主要挑战之一²。

最近, 南京大学物理学院张春峰/肖敏教授课题组联合化学化工学院马晶教授和北京化工大学张志国教授, 实验和理论合作研究表明, 非富勒烯受体光伏体系中, 三线态损耗可以借助受体氟化抑制(图a)。研究人员采用超快光谱学实验结合量子化学计算的方法, 研究了给体PTQ10和模型受体分子IDIC和MO-IDIC的给受体共混体系中(图b)的激发态动力学过程。光谱学实验结果清晰显示双分子复合产生三线态的光谱特征, 在氟化受体的体系中, 三线态产生显著抑制(图c), 载流子的寿命明显延长(图d); 理论计算表明在给受体的界面处, 氟化受体分子和给体分子更强的耦合导致界面处的电荷转移三线态(^3CT)和受体中的局域三线态(^3LE)发生杂化, 界面处的三线态能量降低, 抑制了从界面到受体分子的三线态能量转移过程, 从而减少了三线态复合损耗。研究结果解释了器件优化受体氟化策略的内在机制, 为抑制器件损耗提供了新的思路, 上述相关研究成果近期发表在 *Journal of the American Chemical Society* 上³。

非富勒烯受体在近红外光谱段有很强的吸收, 动力学机制也展现了与富勒烯受体体系不一样的

特征。研究组与多方合作研究了约200多不同给受体组合, 观察到低界面驱动能下高效的空穴转移⁴, 揭示了聚合物受体中构型依赖的电荷转移激发态主导的空穴转移通道⁵; 最近, 在典型PM6/Y6体系中, 研究组观察到由分子间相互作用, 受体畴内激发态媒介的电荷分离过程⁶。电荷分离过程的阐述对理解分子聚集态的光物化机制, 理解非富勒烯受体光伏的工作原理具有重要意义, 也将为器件的进一步优化提供重要依据。

References

- (1) Best research-cell efficiency chart. <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html> (accessed April 5, 2021).
- (2) Rao, A.; Chow, P. C.; Gelinas, S.; Schlenker, C. W.; Li, C. Z.; Yip, H. L.; Jen, A. K.; Ginger, D. S.; Friend, R. H. *Nature* **2013**, 500 (7463), 435. doi: 10.1038/nature12339
- (3) Wang, R.; Xu, J.; Fu, L.; Zhang, C.; Li, Q.; Yao, J.; Li, X.; Sun, C.; Zhang, Z. G.; Wang, X.; Li, Y.; Ma, J.; Xiao, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143 (11), 4359. doi: 10.1021/jacs.0c13352
- (4) Bin, H.; Gao, L.; Zhang, Z. G.; Yang, Y.; Zhang, Y.; Zhang, C.; Chen, S.; Xue, L.; Yang, C.; Xiao, M.; Li, Y. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 13651. doi: 10.1038/ncomms13651
- (5) Wang, R.; Yao, Y.; Zhang, C.; Zhang, Y.; Bin, H.; Xue, L.; Zhang, Z. G.; Xie, X.; Ma, H.; Wang, X.; Li, Y.; Xiao, M. *Nat. Commun.* **2019**, 10 (1), 398. doi: 10.1038/s41467-019-08361-4
- (6) Wang, R.; Zhang, C.; Li, Q.; Zhang, Z.; Wang, X.; Xiao, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142 (29), 12751. doi: 10.1021/jacs.0c04890