

[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201712181

www.whxb.pku.edu.cn

单组份有机太阳能电池纳米相分离调控新策略

吴凯 北京大学化学与分子工程学院,北京 100871

New Strategies to Tune the Nanophase Separation of Single-Component Polymer Solar Cells

WU Kai

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China. Email: kaiwu@pku.edu.cn



(a) 给受体材料、单组份聚合物结构以及共轭骨架理论计算;(b),(c) 聚合物薄膜的 AFM 和 TEM 表征,
1、2、3 分别对应 PBDTPBI、S-PBDTPBI 和 SF-PBDTPBI;(d) 聚合物薄膜的排列模型及 GISAXS 表征;(e) 聚合物的 GIWAXS 表征,e1、e2、e3、e4 分别对应 PBDTPBI,S-PBDTPBI、SF-PBDTPBI和 PBDTT;(f) 单组分太阳电池器件性能表征,f1、f2为 AM1.5G 光谱下的电流-电压曲线和外量子效率,f3、f4 为活性层吸光系数和内量子效率

有机太阳能电池因其质轻、柔性、结构可调、 可溶液加工等特点具有潜在的应用前景,近年来 成为研究热点。其中,双组份或多组分的本体异质 结型太阳能电池的研究最为深入,其能量转换效 率已超过13%^{1,2};然而这类器件存在优化步骤多、 稳定性差等缺点,不利于大面积制备。单组份太阳 能电池中电子给体与受体通过共价键连接组成单 一组份的活性层,使器件相对稳定。单组份聚合物 的设计主要有"rod-rod"或"rod-coil"型的嵌段共 聚物,以及给、受体各自分布在主链与侧链的 "double-cable"型共轭聚合物 3-7。但由于该类聚 合物结构复杂且形貌难以调控,存在激子分离与 电荷传输效率低的问题,导致其光电能量转换效 率相对较低,大都未超过3%。2017年8月,中国 科学院化学研究所李韦伟研究员课题组报道了一 组主链为吡咯并吡咯二酮(DPP)类给体骨架、侧链 为苝酰亚胺(PBI)受体的"double-cable"型共轭聚 合物8,通过延长连接给受体的烷基链长度,改善 聚合物的结晶性,调节聚合物薄膜中的相分离,使 单组份电池的能量转换效率达到 2.74%。

最近,该课题组提出了直线型共轭骨架为主链的分子设计策略,实现"double-cable"型共轭聚合物中小尺度的纳米相分离,从而提升单组份太阳能电池的能量转换效率。该课题组以苯并二噻吩(BDT)的均聚物 PBDTT 为给体共轭主链,PBI为侧链受体单元,合成了一组共轭主链为直线型的"double-cable"型共轭聚合物⁹,并将硫原子和氟原子引入到 BDT 的侧链噻吩上以调节聚合物的能级和结晶性。通过对薄膜形貌表征发现,该聚合物的给体共轭主链 PBDTT 以及受体单元 PBI 在薄膜中具有"face-on"的堆积取向和小尺寸的纳米相分离结构(大约 5 nm),这有利于单组份电池中的激子分离和电荷传输。基于这类聚合物的单组份太阳电池能量转换效率达到了 4.18%,外量子效率和内量子效率分别达到了 0.65 和 0.80,是当前

单组份有机太阳电池的最高性能之一。

该研究工作近期已在 Journal of the American Chemical Society 上在线发表⁹。该工作表明,通 过采用直线型共轭主链的设计策略,单组份聚合 物可以获得优异的纳米相分离结构,进而实现高 性能的单组份有机太阳能电池。该工作将对单组 份太阳能电池的研究具有重大的推动作用。

References

- Zhao, W.; Li, S.; Yao, H.; Zhang, S.; Zhang, Y.; Yang, B.; Hou, J. J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 7148. doi: 10.1021/jacs.7b02677
- Xiao, Z.; Jia, Z.; Ding, L. Sci. Bull. 2017, 62, 1562.
 doi: 10.1016/j.scib.2017.11.003
- Guo, C.; Lin, Y. -H.; Witman, M. D.; Smith, K. A.; Wang, C.;
 Hexemer, A.; Strzalka, J.; Gomez, E. D.; Verduzco, R. *Nano Lett.* 2013, *13*, 2957. doi: 10.1021/nl401420s
- Grieco, C.; Aplan, M. P.; Rimshaw, A.; Lee, Y.; Le, T. P.; Zhang, W.;
 Wang, Q.; Milner, S. T.; Gomez, E. D.; Asbury, J. B. *J. Phys. Chem. C* 2016, *120*, 6978. doi: 10.1021/acs.jpcc.6b00103
- (5) Hiorns, R. C.; Cloutet, E.; Ibarboure, E.; Khoukh, A.; Bejbouji, H.; Vignau, L.; Cramail, H. *Macromolecules* **2010**, *43*, 6033. doi: 10.1021/ma100694y
- (6) Zhang, F.; Svensson, M.; Andersson, M. R.; Maggini, M.; Bucella, S.; Menna, E.; Inganäs, O. *Adv. Mater.* 2001, *13*, 1871. doi: 10.1002/1521-4095(200112)13:24<1871::AID-ADMA1871> 3.0.CO;2-3
- (7) Zhang, Q.; Cirpan, A.; Russell, T. P.; Emrick, T. *Macromolecules* 2009, 42, 1079. doi: 10.1021/ma801504e
- Lai, W.; Li, C.; Zhang, J.; Yang, F.; Colberts, F. J. M.; Guo, B.;
 Wang, Q. M.; Li, M.; Zhang, A.; Janssen, R. A. J.; *et al. Chem. Mater.* 2017, 29, 7073. doi: 10.1021/acs.chemmater.7b02534
- (9) Feng, G.; Li, J.; Colberts, F. J. M.; Li, W.; Li, M.; Zhang, J.; Yang, F.; Jin, Y.; Zhang, F.; Janssen, R. A. J.; *et al. J. Am. Chem. Soc.* 2017, doi: 10.1021/jacs.7b10499