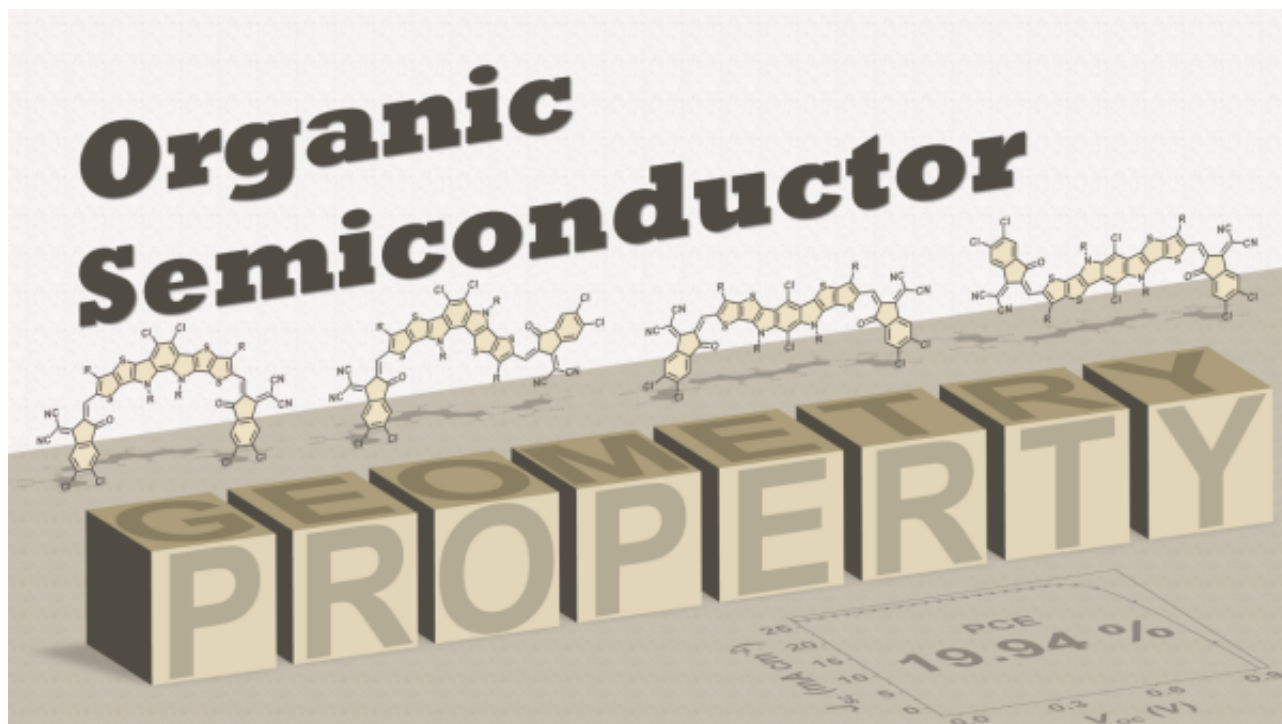


有机太阳能电池A-DA'D-A型小分子受体的“构型-性能”关系研究获进展



分子构型在决定有机半导体材料的物理性质和化学性质方面发挥着关键作用。但是，对于应用于有机太阳能电池的A-DA'D-A型小分子受体（SMA），其构效关系的系统研究仍较为匮乏。

中国科学院化学研究所李永舫课题组联合上海交通大学刘烽课题组，以二氯苯作为A'吸电子单元，突破了传统A'单元因耦合结构带来的构型限制，设计并合成了四种几何构型（C形、形、M形和S形）的苯并二吡咯型小分子受体即C-Cl46-Cl、-Cl46-Cl、M-Cl46-Cl、S-Cl46-Cl，并剖析了分子构型对其光伏性能的影响。

研究发现，分子构型从三方面影响分子的物理化学性质和光伏性能：一是本征理化性质，包括能级分布、吸收光谱、重组能；二是分子堆积模式，影响激子扩散与电荷传输过程；三是给体-受体相互作用及相容性，决定活性层薄膜的形貌。研究显示，C形构型的SMA材料展现出更为理想的能级与吸收范围、更紧密有序的分子堆积模式以及更优的给体-受体相互作用和相容性，使得基于D18:C-Cl46-Cl的二元有机太阳能电池器件实现了19.94%的能量转换效率（经权威机构认证效率为19.54%），达到当前二元有机太阳能电池的先进水平。相比之下，其余构型的SMA在性能表现上存在短板。例如，形SMA吸收能力受限，M形SMA具有较大的重组能与松散的堆积模式，S形SMA则表现出较低的溶解度和过强的聚集性，限制了器件性能提升。

上述研究揭示了A-DA'D-A型小分子受体的“构型-性能”关系，为未来高性能有机光伏材料的分子设计提供了理论指导和参考依据。

相关研究成果以Molecular Geometry-Property Relationship of Benzodipyrrole-Based A-DA'D-A Type Acceptors for High-Performance Organic Solar Cells为题，发表在《德国应用化学》上。研究工作得到国家自然科学基金等的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/225371.html>