

聚合物太阳能电池光伏材料的分子设计策略

太阳能电池(或称太阳能电池)是将太阳能直接转化成电能的装置,是实现双碳目标的重要途径之一。目前晶体硅太阳能电池已经得到广泛应用,中国晶硅太阳能电池的生产技术和生产规模都处于国际领先水平。

聚合物太阳能电池由 p -型共轭聚合物给体和 n -型有机半导体受体的共混活性层夹在一个透明底电极和金属顶电极之间组成。这种太阳能电池具有重量轻、活性层薄、可以制备成柔性和半透明器件等突出优点,可实现与晶硅太阳能电池互补的应用,尤其在可穿戴能源及建筑光伏一体化等方面有重要应用前景,因此近年来成为研究的热点。

聚合物太阳能电池的工作机理是:光透过透明电极照射到活性层上,活性层中的给体和受体光伏材料吸收光子产生激子(束缚态的电子-空穴对);激子扩散到给体/受体界面并在界面处发生电荷分离,分离后的电子在受体的LUMO能级上、空穴在给体的HOMO能级上;在器件内建电场的驱动下,电子和空穴分别沿受体和给体网络传输到负极和正极并被电极收集形成光电流和光电压。根据这一工作机理,高效的聚合物太阳能电池给体和受体光伏材料需要具备以下基本性质:(1)给体和受体光伏材料可见-近红外区需要吸收互补、活性层在可见-近红外区具有宽而强的吸收;(2)需要给体和受体的最高占有分子轨道(HOMO)和最低空分子轨道(LUMO)能级相匹配(给体的HOMO和LUMO能级需要高于对应的受体的HOMO和LUMO能级,同时其能级差要高于激子束缚能),既保证在给体/受体界面上激子的有效电荷分离,又达到具有最高的开路电压(开路电压与受体的LUMO与给体的HOMO之差成正比);(3)给体和受体光伏材料最好具有小的激子束缚能和大的激子扩散长度;(4)给体需要有高的空穴迁移率、受体需要有高的电子迁移



李永舫,物理化学和高分子化学家,中国科学院院士。现为中国科学院化学研究所研究员、苏州大学材料与化学化工学部教授。主要研究方向为光电功能高分子。

率,并且最好给体、受体迁移率能够平衡;(5)给体和受体光伏材料必须可溶;(6)给体和受体共混活性层能自组装形成纳米尺度相分离的给体/受体互穿网络结构。

第1个可溶液加工的聚合物太阳能电池是1995年报道的,使用的受体是可溶性C60衍生物PCBM,其优点是具有较高的电子迁移率和较强的吸电子能力;但是其吸收峰位于短波长的250~400 nm,对太阳光的利用率差,同时其LUMO和HOMO能级较低,受体过低的LUMO能级会导致器件的开路电压较低。这就需要使用窄带隙、宽吸收、具有较高空穴迁移率和较低HOMO能级的聚合物给体。因此,研究的重点是设计合成符合这一要求的聚合物给体光伏材料,分子设计策略包括给电子(D)单元与受电子(A)单元的D-A共聚(拓宽吸收和降低HOMO能级)、使用共轭侧链(拓宽吸收和提高空穴迁移率)和吸电子取代基(降低HOMO能级)。但是,由于受富勒烯受体差的吸收和难调的电子能级的限制,基于富勒烯受体的聚合物太阳能电池的光电转换效率最高只能达到10%左右。

2015年,中国学者报道了

窄带隙的A-D-A结构有机半导体受体,其中心是一个稠环给电子(D)结构单元、两端是强吸电子受体(A)单元。这类小分子具有宽吸收(吸收边拓展至800 nm左右)、合适和可调的LUMO和HOMO能级以及高的电子迁移率等突出优点。使用与其吸收互补的宽带隙聚合物给体共混,基于这类小分子受体的聚合物太阳能电池的效率很快提升至10%~14%的水平。2019年,中国学者进一步报道了A-DA'D-A结构的小分子受体,使受体的吸收边进一步红移至超过900 nm,并且基于这类受体的聚合物太阳能电池的能量损失进一步缩小,使聚合物太阳能电池的光电转换效率进一步提升至15%~19%的高水平,从而确立了中国学者在聚合物太阳能电池中的引领地位。

目前,聚合物太阳能电池的效率已达到可向实际应用发展的阶段,但是,要实现实际应用,还需要降低光伏材料和器件制备的成本以及提高器件稳定性和工作寿命。当前,高效给体和受体光伏材料大多数结构复杂、合成步骤多,从而导致产率低和成本高。可以通过设计合成结构简单的宽带隙聚合物给体光伏材料以及开发A-DA'D-A型小分子受体的低成本合成路线,来降低光伏材料的合成成本。另外,全聚合物太阳能电池具有成膜性、柔韧性和稳定性好的突出优点。高效聚合物受体是提高全聚合物太阳能电池光电转换效率的关键,2017年,笔者课题组提出的小分子受体高分子化的策略为合成高效聚合物受体开辟了一条新的途径,将全聚合物太阳能电池的效率从8%提升至超过17%。接下来,需要在这类聚合物受体光伏性能的批次重复性、降低这类聚合物受体的合成成本和放大合成上努力。相信在不久的将来,柔性聚合物太阳能电池将走进千家万户。

李永舫

(中国科学院化学研究所,北京 100080;
苏州大学,苏州 215031)