

(../index.htm)

English  
(<http://www.chem.tsinghua.edu.cn/chemen/>)  
清华大学 (<https://www.tsinghua.edu.cn>)

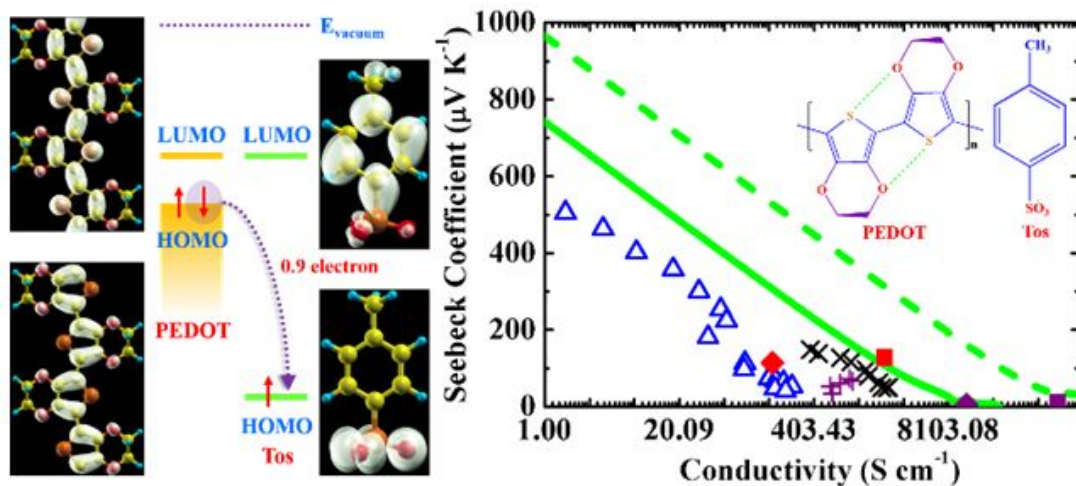


## 有机功能材料中热电转换与载流子输运的理论研究取得新进展

发布时间: 2015-10-28 点击数: 10

有机材料作为一种新型光电功能材料，近年得到人们的广泛关注，发光材料已经在显示和照明方面商业化，光伏转换效率突破11%、热电优值超过0.4。但是，由于载流子的运动受到电荷局域化、无序/杂质的散射等复杂因素，使得人们对载流子的微观运动过程认识不清，一直存在众多的争议，阻碍了材料设计。化学系帅志刚教授课题组针对这一问题，取得如下进展：（1）与王冬副教授合作，采用玻尔兹曼方程，综合考虑声子散射和杂质散射的竞争，并结合第一性原理计算，定量阐述了聚合物PEDOT中掺杂浓度对热电转换过程以及载流子输运的影响。相关结果以“Unravelling Doping Effects on PEDOT at the Molecular Level: From Geometry to Thermoelectric Transport Properties.”为题，发表在Journal of the American Chemical Society 2015, 137(30), 12929-12938上（）。化学系研究生石文是该文的第一作者；（2）与厦门大学赵仪教授合作，在先前他们共同提出的局域电荷量子核隧穿模型的基础上，通过发展含时波包扩散理论，研究了电荷局域化与核隧穿之间的竞争关系，并针对5种高迁移率有机材料，定量地对比了这两种效率的大小。结果表明，局域化电荷的量子核隧穿效应在许多有机材料仍然是主导电荷传输的机制，电荷局域效应依赖于体系：有些材料不重要，有些材料需要考虑。该研究结果在电荷传输的两种极端模型，即半经典Marcus理论和全离域的能带理论之间架起了一座桥，更加普适。相关结果以“Nuclear tunnelling and carrier delocalization to bridge the gap between hopping and bandlike behaviors in organic semiconductors”发表在Nanoscale Horizon的创刊号上（<http://pubs.rsc.org/en/content/ar>

articlepdf/2016/NH/C5NH00054H)。该文的第一作者江昱倩是化学系研究生。(3) 提出了有机材料给-受体之间电荷传输的超交换机理及其第一性原理的计算方法, 给出了通过超交换机制来实现空穴传输、电子传输或者双极传输的能级匹配条件。相关结果以“Understanding the charge transport and polarities in organic donor-acceptor mixed-stack crystals: molecular insights from the super-exchange couplings”为题, 发表在Advanced Materials 2015, 27(8), 1443-1449。该文的第一作者耿华是中国科学院化学研究所副研究员, 长期与帅志刚课题组合作。



掺杂PEDOT的电子结构与热电输运性能

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jacs.5b06584>