



化学所二维共轭聚合物光伏材料的分子设计研究获系列进展

文章来源：化学研究所

发布时间：2012-09-25

【字号：小 中 大】

聚合物光伏材料的分子结构与其光伏性能具有十分密切的关系。根据目前报道的结果来看，对光伏聚合物的分子结构优化大多是针对某一个聚合物来进行的，也就是说，对于不同的分子结构，人们需要采用不同的方式对其进行优化。这不仅增大了分子结构优化工作的难度，也容易导致错过很多具有潜力的分子结构单元。因此，找到一种能改善聚合物光伏性能的具有广泛适用性的方法将是一项十分重要的工作。

在中国科学院、科技部、国家自然科学基金委的大力支持下，最近，化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室和有机固体院重点实验室在聚合物光伏材料的分子结构设计方面取得了系列进展。

研究人员将二维共轭结构引入到苯并二噻吩(BDT)单元中，设计了如图1所示的噻吩取代BDT二维共轭结构单元，并将这一单元与各种共轭结构单元共聚，获得了一系列的具有二维共轭结构的共轭聚合物（见图1）。光伏测试结果表明，这类二维共轭聚合物与烷氧基取代的对应聚合物相比，光伏能量转换效率（PCE）都得到了有效的提升（见图1和图2，相关结果发表于*Macromolecules* 2011, 44, 4035; *Macromolecules* 2012, 45, 3032; *Macromolecules* 2012, DOI:10.1021/ma301254x; *Chem. Commun.* 2011, 47, 8850; *J. Mater. Chem.* 2012, DOI: 10.1039/c2jm32931j）。其中，基于二维共轭聚合物PBDDTT-C-T的聚合物太阳能电池的效率提高到7.6% (*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, 50, 9697)。研究人员与香港大学合作，通过使用新型器件结构，使PBDDTT-C-T的光伏效率进一步提高到8.79% (*Adv. Mater.*, 2012, 24, 3046)。他们还与美国麻省大学的研究人员合作，通过射掠X射线衍射对聚合物太阳能电池活性层形貌进行了清晰的表征 (*Adv. Mater.*, 2012, 24)。

同时，研究人员还把强吸电子基团sulfonyl引入到聚合物PBDDTT中合成了PBDDTT-S，该聚合物具有较低的HOMO能级，基于PBDDTT-S的光伏器件PCE达到6.22%，开路电压达到0.76 V (*Chem. Commun.* 2011, 47: 8904)。最近，他们通过插入噻吩p-桥和噻吩取代制备了二维共轭聚合物PBDDTTT-S-T，该聚合物具有较好的平面结构和较强的链间相互作用，基于PBDDTTT-S-T的聚合物太阳能电池的PCE最高达到7.81% (*Adv. Mater.*, 2012, 24, 3383)。

需要指出的是，采用二维共轭概念对聚合物的光伏性能进行改进是2004年由化学所研究人员首次提出（专利：（1）“一种支链共轭聚噻吩衍生物材料及其制备方法”，专利号：ZL 2004 1 0088723.8；（2）“一种两维共轭聚合物及其制备方法与应用”，专利号：ZL 2005 1 0132380.5；代表性论文：*J. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128, 4911; *Macromolecules*, 2006, 39, 594）。目前取得的研究成果是他们二维共轭聚合物光伏材料研究工作的有力延续。

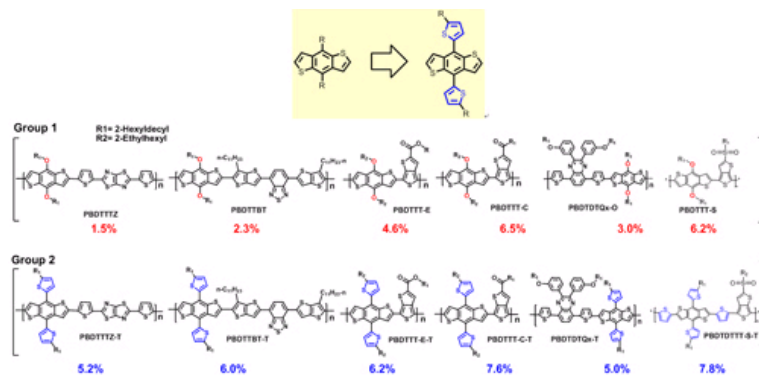


图1 两维共轭BDT单元与两维共轭聚合物的分子结构示意图

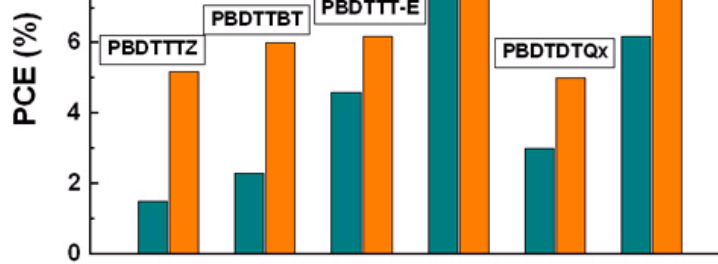


图2 含噻吩共轭支链的二维共轭聚合物与含烷氧基支链的非二维共轭聚合物光伏性能对比（青色——非二维共轭聚合物；橙色——二维共轭聚合物）

打印本页

关闭本页