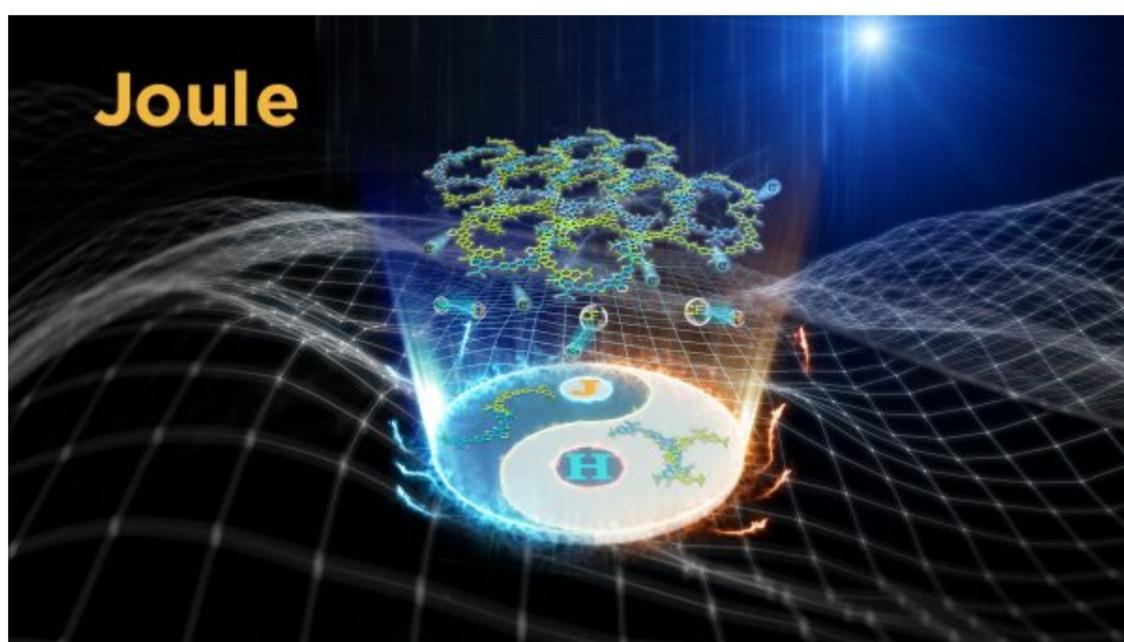


# 南科大何凤课题组合成非富勒烯三维网络结构的高效太阳能电池受体材料

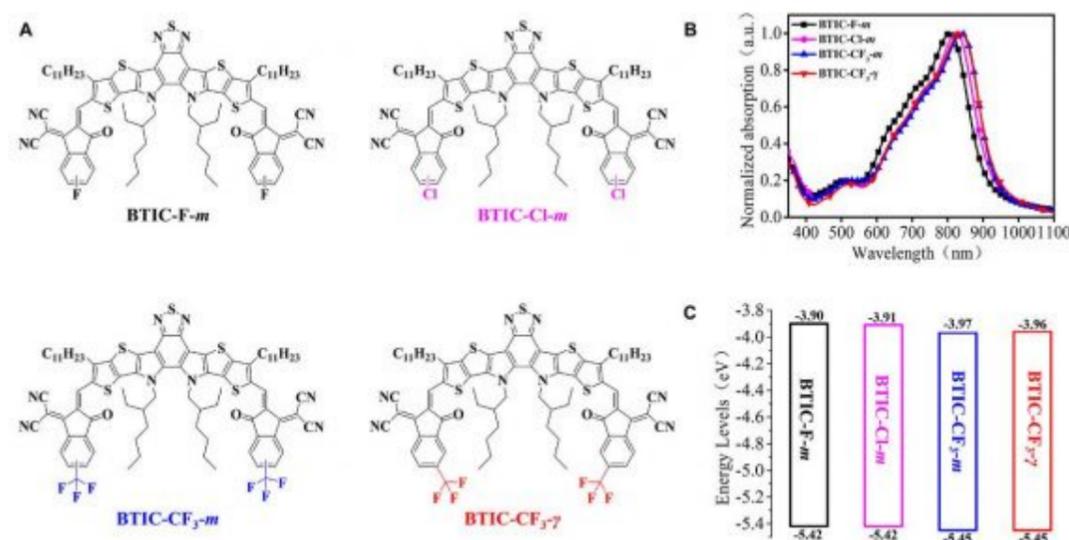
2020年04月13日 科研新闻 浏览量： 1523

近日，南方科技大学化学系副教授何凤课题组在能源领域顶级期刊*Joule*发表最新研究成果，介绍了团队合成的一种定位三氟甲基取代的高效有机太阳能电池受体材料，该材料可通过H/J聚集的协同作用形成具有更多电子跳跃传输结点的三维网络结构，可极大改善电荷在分子间的传输，大幅提高器件性能。



有机非富勒烯小分子受体材料由于设计合成简单，在可见光甚至是近红外区域有较强吸收，且能级可调，因而近年来受到了越来越多的关注，其研究也取得了突破性进展。尤其是基于稠环单元的小分子受体材料，通过优化其稠环单元结构，调整烷基侧链，以及引入卤原子等方法，可以使其单节太阳能电池的能量转换效率突破16%。其中，卤原子的引入可以有效调控这类小分子的吸收光谱以及能级分布，是一种非常简单有效的提升非富勒烯有机太阳能电池器件性能的途径。大多数小分子受体材料引入氟、氯或者溴原子后吸收光谱红移，HOMO和LUMO能级降低，电子迁移率提升，结晶性改善，进而得到更好的器件性能。然而，相比引入单个卤原子，三氟甲基官能团对有机太阳能电池受体的影响却鲜有报道。

课题组成功设计并合成了三氟甲基化的端基IC-CF<sub>3</sub>-*m*，并使用重结晶分离策略得到了三氟甲基定位取代的端基IC-CF<sub>3</sub>-*γ*，两者与BT-2CHO发生Knoevenagel缩合反应，得到了两个窄带隙小分子BTIC-CF<sub>3</sub>-*m*和BTIC-CF<sub>3</sub>-*γ*。研究发现，相较于氟原子取代的BTIC-F-*m*和氯原子取代的BTIC-Cl-*m*，BTIC-CF<sub>3</sub>-*γ*吸收光谱红移幅度更大，其吸收边达到了951nm，对应的光学带隙为1.3eV，属于超窄带隙受体的范畴，这极大地得益于三氟甲基超强的吸电子能力。



返回

## 最新动态

< >

### 多国驻华使节与国际组织代表来校访问

2020年11月20日上午，25名驻华使节和国代表来我校访问。中国政府中东事务特别代表、外交部礼宾司副司长李安容、深圳市委

### 中国证监会原主席肖钢南科大讲堂畅谈多层次资本市场建设

2020年11月19日，第十三届全国政协经济委员会委员、中国证监会原主席肖钢做客第261期讲堂，为我校师生带来以“我国多层次资本

## 热点阅读

查看更多

### 南科大李闯创团队在复杂天然产物全合成发表多篇综述性评论文章

近期，南方科技大学化学系教授李闯创课题应邀在Accounts of Chemical Research、Chemical Reviews、Chemical Society

### 带着南科大精神，从“新”出发——陈校长在2020年开学典礼上的讲话

南科大校长陈十一在2020年开学典礼上以“南科大精神，从‘新’出发”为题发表讲话。

图1. 受体分子结构以及其吸收光谱和能级结构示意图

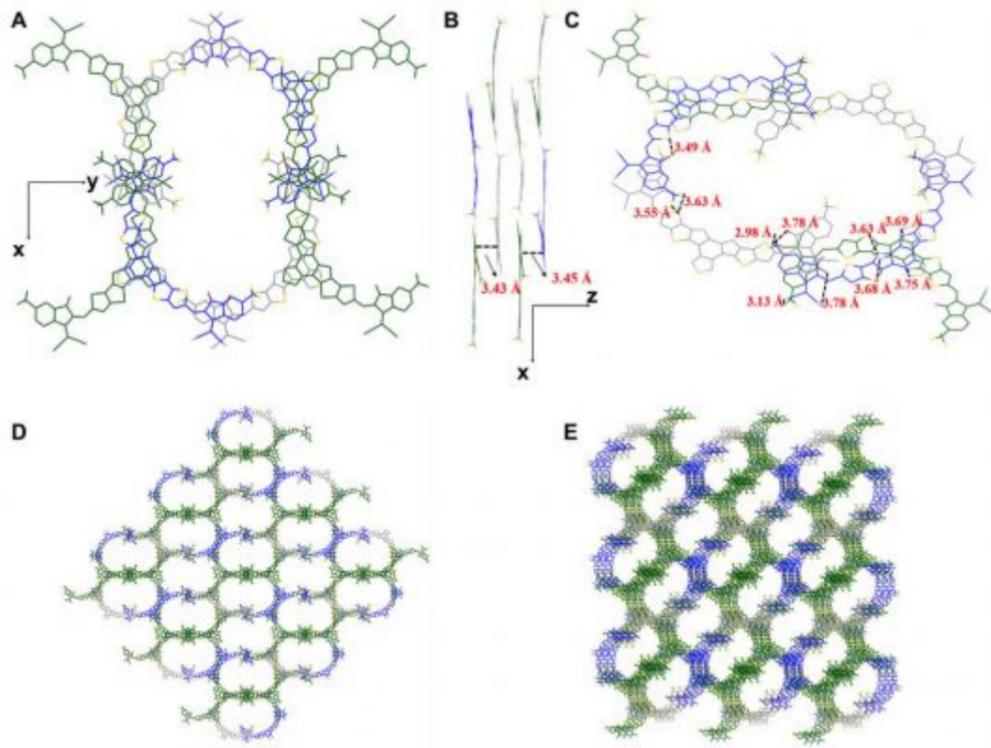


图2. BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 受体分子的单晶结构

通过研究BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 分子的单晶结构，团队发现BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 分子中S...O=C构型互锁的Y型平面结构，使中心的两个端基位于骨架的同一侧。对于常见的小分子受体体系，分子间主要通过端基与端基之间的 $\pi$ - $\pi$ 相互作用堆积形成J聚集主导的分子排列。而在BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 的单晶中，研究人员发现，分子间不仅存在端基与端基之间的J聚集，还有稠环核心之间的堆积形成的H聚集，因此BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 分子间的堆积具有J-聚集和H-聚集交互的分子排列堆积特征，这种排列堆积方式能形成更多的分子间结点，更有利于载流子的高效传输。此外，三氟甲基的引入并没有因为位阻效应破坏分子间的堆积，反而形成了三氟甲基与硫原子之间强的多重相互作用。这些多重分子间相互作用和H/J聚集的协同作用使BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 形成了一个具有更多电子跳跃传输结点的三维网络结构，这类似于富勒烯材料中各向同性的传输，可极大加快电荷在分子间的传输，显著改善器件性能。

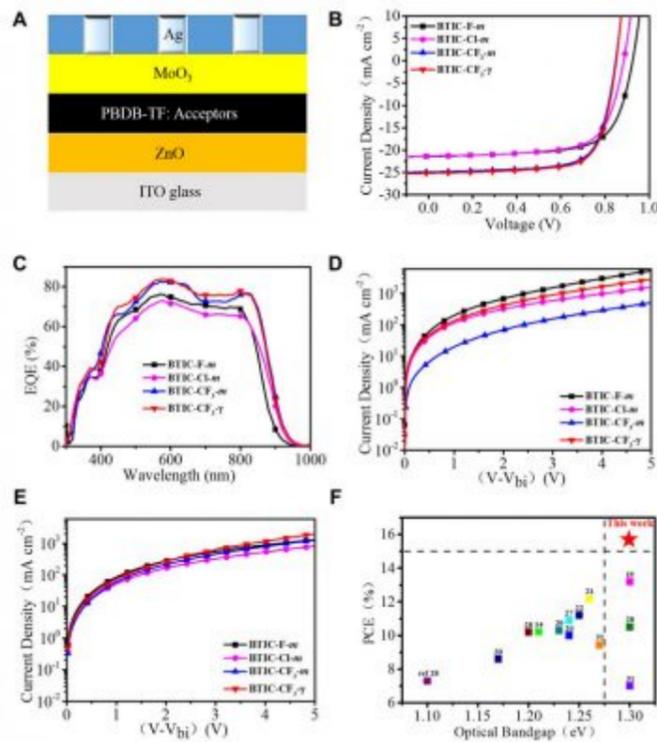


图3. 太阳能电池器件数据

在器件研究中，研究人员将BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 与给体PBDB-TF共混，所制备的太阳能电池器件能量转化效率可达15.59%，而基于氟取代的BTIC-F-m和氯取代的BTIC-Cl-m器件效率分别只有13.61%和13.16%，这得益于BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 超窄的带隙以及显著红移的吸收光谱。值得注意的是，15.59%的效率在超窄带隙材料（带隙小于等于1.30eV）中是目前文献报道的最高值。再将BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 与Y6，PBDB-TF共混制备三元器件后，其能量转化效率更是达到了16.50%，进一步显示出BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 在三元体系等器件结构中的巨大应用价值。

在该研究中，团队成功地将三氟甲基引入到稠环电子受体中，得到了超窄带隙受体BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ ，并将其应用于太阳能电子器件中，极大地提高了器件的能量转换效率，充分体现出光谱红移和超窄带隙的优势，在多元体系、半透明器件和叠层器件应用方面展示出非常有潜力的前景。更重要的是，BTIC-CF<sub>3</sub>- $\gamma$ 的单晶结构有助于研究人员从分子层面理解这类分子的堆积形式以及分子间相互作用，也为进一步设计新的高性能材料提供了有利的依据和指导。

2017级南科大-哈工大联培直博生赖寒健是论文第一作者，南科大化学系博士后赵巧巧、陈子毅和前沿与交叉科学研究院研究助理教授陈晖为文章共同第一作者，化学系副教授何凤为通讯作者，南方科技大学为第一单位和唯一通讯单位。此外，华南理工大学郑楠博士、南科大化学系副教授张元竹、2016级南科大-北大联培博士

生晁鹏杰、2016级南科大-澳门大学联培博士生莫代泽、2018级南科大-哈尔滨工业大学联培博士生祝育林以及南科大2017级本科生朗咏雯也对该文有重要贡献。

本研究得到了国家自然科学基金、深圳基础研究计划、深圳市诺贝尔奖科学家实验室、广东省创新创业团队项目和南方科技大学分析测试中心的大力支持。

文章链接:

<https://doi.org/10.1016/j.joule.2020.02.004>

供稿单位: 化学系

编辑: 吴一敏

主图设计: 丘妍



南方科技大学  
新闻网

## 新闻网

新闻中心

搜索

## 相关链接

官方网站

学校概况

院系设置

师资概况



© 2017 SUSTech. All Rights Reserved.

