科学通报 2024 年 第 69 卷 第 31 期: 4511 ~ 4513
悦读科学
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

三元有机太阳能电池光电转换效率超过20%

蒋沅原[1,2], 刘峰[1*], 朱晓张[1,2*]

1. 中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家研究中心, 中国科学院有机固体重点实验室, 北京 100190;
2. 中国科学院大学化学科学学院, 北京 100049
* 联系人, E-mail: liufeng112@iccas.ac.cn; xzzhu@iccas.ac.cn

Ternary organic solar cell with high efficiency over 20%

Yuanyuan Jiang[1,2], Feng Liu[1*] & Xiaozhang Zhu[1,2*]

[1] *CAS Key Laboratory for Organic Solids, Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;*
[2] *School of Chemical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*
* Corresponding authors, E-mail: liufeng112@iccas.ac.cn; xzzhu@iccas.ac.cn

doi: 10.1360/TB-2024-0873

有机太阳能电池因其质轻、柔性、半透明和可通过溶液加工实现大面积器件制备等特性, 在可穿戴电子设备和建筑一体化等领域展现出巨大的应用前景. 相比于无机半导体材料, 有机半导体材料通常具有较低的介电常数, 其吸收光子后产生的Frenkel激子受库伦力束缚作用, 无法直接解离成自由电荷. 1995年, Heeger等人[1]提出"本体异质结"概念, 即给体材料和受体材料在整个活性层范围充分混合, 一方面提供大量给/受体界面用于光生激子解离, 另一方面形成连续互穿的给/受体相分离结构用于高效电荷传输. 在过去的几十年中, 为了提高有机太阳能电池的光电转换效率, 研究人员在新型给体材料、受体材料和器件工程等方面开展了大量工作并取得了突破性进展. 自2015年, Zhan课题组[2]报道了新型稠环非富勒烯电子受体材料ITIC以来, 基于非富勒烯电子受体材料的有机太阳能电池光电转换效率的不断取得新突破. 2019年, Zou课题组[3]报道了A-DA'D-A型非富勒烯电子受体材料Y6, 单结有机太阳能电池光电转换效率超过15%. 2021年, Hou课题组[4]首次报道了光电转换效率突破20%的叠层有机太阳能电池. 然而, 较为复杂的器件制备工艺和高成本限制了实际应用. 发展新型活性层材料或器件工艺对实现有机太阳能电池性能突破极具迫切性和挑战性, 同时对实现有机太阳能电池的商业价值也具有重要意义.

有机太阳能电池的光电转换效率(PCE)主要由三个参数决定: PCE = V_{OC} × J_{SC} × FF/P_{in}, 其中V_{OC}为开路电压, J_{SC}为短路电流密度, FF为填充因子, P_{in}为入射光功率. Shockley-Queisser(S-Q)理论预测有机太阳能电池的极限效率约为33%, 这表明有机太阳能电池仍有很大提升空间. 缩短实际效率与S-Q理想效率之间差距的关键在于如何通过分子设计和器件工程同时减少电压损失获得高V_{OC}, 提高光子利用率实现高J_{SC}, 以及保持理想共混薄膜纳米形貌实现高FF. 基于S-Q理论, 理想太阳能电池的电压损失范围在0.20~0.30 eV[5]. 目前, 非富勒烯基有机太阳能带电池仍表现出较大的电压损失(~0.50 eV), 这主要是吸收边展宽和较强的非辐弛豫引起的. 最近研究表明, 抑制带尾能量无序度[6]和增强局域激发(LE)态与电荷转移(CT)态之间的杂化程度[7]能有效减小复合导致的电压损失. 在光子利用率方面, 传统硅基太阳能电池的J_{SC}可达到S-Q理论值的90%, 高于当前有机太阳能电池的80%. 有机太阳能电池的光子损失主要来源于三方面: (1) 内量子转换效率损失; (2) 中间层和电极的寄生吸收; (3) 器件反射. 其中, 内量子转换效率损失主要与活性层材料相关, 后两点由器件结构决定. 进一步提升J_{SC}亟需材料设计和器件结构优化的共同努力. 填充因子是影响光电转换效率的另一个关键因素, 其损失主要来源于界面和体相的电荷复合, 这与有机半导体较低的载流子迁移率和活性层共混纳米形貌紧密相关. 引入第三种光活性材料来构建三元有机太阳能电池是一种提高器件性能的有效策略[8]. 三元共混薄膜的构筑可以实现互补性吸收、拓宽吸收窗口, 提高太阳光谱利用率; 另一方面, 第三组分的加入可有效调控活性层的纳米形貌, 构筑理想的双连续相分离网络结构, 实现高效电荷传输. 理性设计光活性层材料来构建高性能三元有机太阳能电池是实现效率突破的关键[8].

非富勒烯受体材料的光电特性和固态聚集行为受共轭骨架主链和侧基协同调控. 近期研究表明不对称非富勒烯受

© 2024《中国科学》杂志社

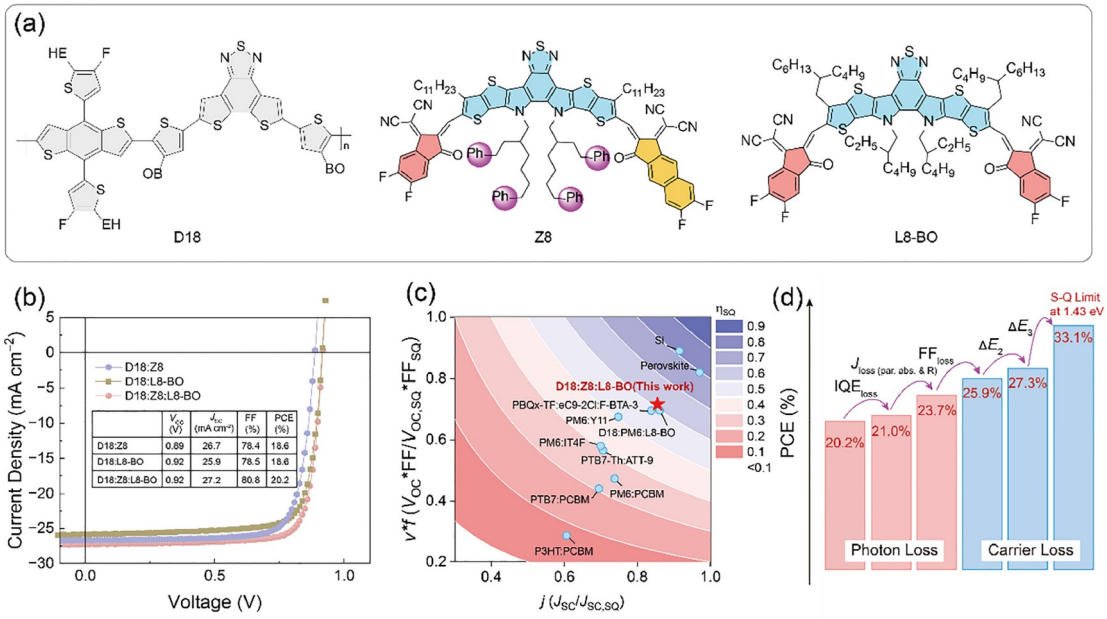


图 1 (网络版彩色)研究体系的分子结构式及器件性能分析. (a) D18, Z8, L8-BO分子结构式. (b) 二元和三元器件的电压-电流密度曲线. (c) 基于D18:Z8:L8-BO的三元有机太阳能电池(OSC)的光子损失(j=$J_{SC}/J_{SC,SQ}$)和载流子损失(v*f=$V_{OC}/V_{OC,SQ}$*FF/FF_{SQ})与其他OSC的比较. 其中, η_{SQ}定义为PCE/PCESQ. (d) 有机太阳能电池器件性能提升空间分析

Figure 1 (Color online) Chemical structure and the photovoltaic performance analysis of the investigated system. (a) Molecular structure of D18, Z8, and L8-BO. (b) The voltage-current density curves of the binary and ternary devices. (c) Comparison of the photon loss (j=$J_{SC}/J_{SC,SQ}$) and carrier loss (v*f=$V_{OC}/V_{OC,SQ}$*FF/FF_{SQ}) of the D18:Z8:L8-BO-based ternary OSC with those of other OSCs.η_{SQ} is defined as the PCE/PCE_{SQ}. (d) The detailed improvement room of photovoltaic performance

体表现出更大的偶极矩和分子间结合能，有助于促进电荷传输. 基于此，我们在不对称分子骨架内侧引入新型的苯基烷基侧基(2-苯乙基-6-苯基己基)合成了非富勒烯受体材料Z8(图1(a))[9]. 苯基烷基侧基的引入提高了非富勒烯受体材料的荧光量子产率和激子离域性，减小了非辐射能量损失. 苯基烷基侧基可通过“苯基-苯基”“苯基-共轭骨架”相互作用参与受体分子内和分子间堆积，有效抑制分子振动，降低了电子-声子耦合; 另一方面苯基烷基侧基可以增强给/受体材料相互间作用，促进电荷转移. 非富勒烯受体材料Z8与L8-BO具有良好的混溶性，可形成合金受体; 在与D18作为给体的三元器件中可实现20.2%的光电转换效率(中国计量科学研究院第三方认证效率为19.8%). 相比于二元器件, 三元器件实现了开路电压、短路电流和填充因子的协同提升(图1(b)), 这与第三组分优异的光电性质和固态分子聚集行为密切相关. 引入兼具高发光效率和高激子离域特性的非富勒烯受体Z8有效降低了共混体系的非辐射能量损失; 拓宽的光响应范围和低的电荷复合有利于实现高光电流; 理想共混薄膜形貌(增强的结晶性、合适的相区尺寸、垂直组分分布)的形成进一步提升了器件的填充因子. 此外，针对最优的D18:Z8:L8-BO三元体系，我们在S-Q条件下计算了有机太阳能电池器件效率损失的主要途径: 光子损失和载流子损失(图1(c)), 并对器件性能提升的空间进行了分析(图1(d)), 相关研究为发展更高性能的有机太阳能电池提供了理论支持——即性能的进一步提升需要整合材料创新和器件工程. 一方面，研究人员应开发兼具高发光和高迁移率的新一代光伏材料; 另一方面，器件结构需要进一步优化，从而最大限度地消除光子损失和载流子损失. 这些方向将为有机太阳能电池性能的提升提供更广阔的研究空间.

推荐阅读文献

1 Yu G, Gao J, Hummelen J C, et al. Polymer photovoltaic cells: Enhanced efficiencies via a network of internal donor-acceptor heterojunctions. Science, 1995, 270: 1789–1791

2 Lin Y, Wang J, Zhang Z, et al. An electron acceptor challenging fullerenes for efficient polymer solar cells. Adv Mater, 2015, 27: 1170–1174

3 Yuan J, Zhang Y, Zhou L, et al. Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core. Joule, 2019, 3: 1140–1151

4 Zheng Z, Wang J, Bi P, et al. Tandem organic solar cell with 20.2% efficiency. Joule, 2022, 6: 171–184
5 Yao J, Kirchartz T, Vezie M S, et al. Quantifying losses in open-circuit voltage in solution-processable solar cells. Phys Rev Appl, 2015, 4: 014020
6 Liu S, Yuan J, Deng W, et al. High-efficiency organic solar cells with low non-radiative recombination loss and low energetic disorder. Nat Photonics, 2020, 14: 300–305
7 Chen X K, Qian D, Wang Y, et al. A unified description of non-radiative voltage losses in organic solar cells. Nat Energy, 2021, 6: 799–806
8 Lu L, Kelly M A, You W, et al. Status and prospects for ternary organic photovoltaics. Nat Photonics, 2015, 9: 491–500
9 Jiang Y, Sun S, Xu R, et al. Non-fullerene acceptor with asymmetric structure and phenyl-substituted alkyl side chain for 20.2% efficiency organic solar cells. Nat Energy, 2024, 9: 975–986