

基于三元非富勒烯体系的高效有机太阳能电池

周朋超 张卫东 顾嘉陆 陈卉敏 胡腾达 蒲华燕 兰伟霞 魏斌

Dual non-fullerene acceptors based high efficiency ternary organic solar cells

Zhou Peng-Chao Zhang Wei-Dong Gu Jia-Lu Chen Hui-Min Hu Teng-Da Pu Hua-Yan Lan Wei-Xia Wei Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 198801 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20200624

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200624>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高效平面异质结有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池的质量管理

Quality management of high-efficiency planar heterojunction organic-inorganic hybrid perovskite solar cells

物理学报. 2018, 67(15): 158801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172600>

一种新的基于频域有限差分方法的小周期有机太阳能电池的光电特性

Optical and electrical properties of short-pitch solar cells with finite-difference frequency-domain method

物理学报. 2018, 67(17): 178102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180821>

X波段高效率速调型相对论返波管研究

Investigation of an X band high efficiency klystron-like relativistic backward wave oscillator

物理学报. 2020, 69(16): 164102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200434>

双添加剂处理电子传输层富勒烯衍生物[6, 6]-苯基-C61丁酸甲酯对钙钛矿太阳能电池性能的影响

Influence of phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PCBM) electron transport layer treated by two additives on perovskite solar cell performance

物理学报. 2017, 66(11): 118801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.118801>

有机阳离子对卤素钙钛矿太阳能电池性能的影响

Effects of organic cations on performance of halide perovskite solar cell

物理学报. 2018, 67(10): 106701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180236>

冷原子系综中两正交光场偏振模高效率存储的实验研究

Highly-efficient optical storage of two orthogonal polarization modes in a cold atom ensemble

物理学报. 2018, 67(1): 014204 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171217>

基于三元非富勒烯体系的高效有机太阳能电池*

周朋超¹⁾ 张卫东²⁾ 顾嘉陆¹⁾ 陈卉敏¹⁾ 胡腾达¹⁾

蒲华燕¹⁾ 兰伟霞^{1)†} 魏斌¹⁾

1) (上海大学机电工程与自动化学院, 上海 200444)

2) (上海交通大学电子信息与电气工程学院微米/纳米加工技术国家级重点实验室, 上海 200240)

(2020 年 4 月 27 日收到; 2020 年 5 月 28 日收到修改稿)

有机材料的“窄吸收”特性制约了有机太阳能电池 (OPVs) 性能的进一步突破, 二元体异质结薄膜难以实现对太阳能的有效宽光谱利用. 三元 OPVs 在二元体系中引入吸收互补的第三组分, 能够增强器件光吸收, 实现光电转化效率的大幅提升. 近年来, 非富勒烯受体材料的飞速进展, 多次刷新有机太阳能电池最高效率记录, 丰富并扩展了三元受体材料的选择范围. 本文以非富勒烯受体材料 Y6 作为第三组分材料, 高效率非富勒烯太阳能电池 PBDB-T-2F: IT-4F 作为基础二元器件, 研究并分析了以双非富勒烯材料为受体的三元有机太阳能电池工作机理. 通过光电特性分析, 发现 Y6 的引入不仅能够增强器件近红外区域的光吸收能力, 而且能够有效抑制双分子复合, 提高电荷取出率, 从而提高器件能量转换效率. 通过调节 Y6 在三元体系中的质量百分比, 在 Y6 占比为 20 wt% 时, 器件实现最高的能量转换效率 12.48%, 相比于基础二元器件 (10.59%) 实现了 17.85% 的性能提升.

关键词: 有机太阳能电池, 三元体系, 非富勒烯受体, 高效率

PACS: 88.40.jr, 88.40.H-, 85.60.-q, 73.50.Pz

DOI: 10.7498/aps.69.20200624

1 引言

与传统硅基太阳能电池相比, 有机太阳能电池 (organic photovoltaics, OPVs) 制造成本低、材料来源广、制备工艺简单, 具有轻量、柔性、超薄、透明等优势, 便于运输以及灵活部署, 尤其可通过价格低廉的印刷工艺生产大面积柔性器件, 已经成为光伏产业中最具潜力的发展方向之一^[1–4]. 传统 OPVs 由聚合物给体和富勒烯受体共混作为光吸收活性层, 但由于富勒烯受体材料吸光能力较弱且带隙可调控性差, 导致器件能量转换效率较低^[5–7].

与富勒烯受体相比, 非富勒烯受体材料的结构差异大, 带隙可调节空间大, 在光谱吸收、能级调

控以及光化学稳定性等方面均表现出巨大的优势. 自 2015 年 Zhan 等^[8,9]报道了非富勒烯受体材料 ITIC 以来, 基于非富勒烯受体材料的 OPVs 器件效率不断取得突破. 2017 年 Hou 等^[10–12]开发了新型非富勒烯受体材料 IT-4F, 并实现有机太阳能电池效率首次突破 13%. 2019 年 Zou 等^[13]报道了新型窄带隙受体 Y6, 基于 Y6 的 OPV 器件实现了超过 15% 的能量转换效率. 随着研究的不断深入, 非富勒烯有机太阳能电池展现出巨大的商业应用价值, 然而目前所达到的器件效率仍不足以满足商业化应用的要求, 如何进一步提升 OPVs 器件的性能是当前的研究热点之一^[14]. 除了设计新型给体/受体材料外, 界面修饰、串联器件及三元体系也是提升 OPVs 性能的有效方法^[15–21].

* 国家自然科学基金重大研究计划 (批准号: 91748116) 和国家自然科学基金青年科学基金项目 (批准号: 62005152) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: weixia_lan@shu.edu.cn

通过在二元体系中引入吸收互补的第三组分形成的三元 OPVs 器件,能够有效增强器件光吸收能力,从而实现光电转化效率的大幅提升^[22]. 2017 年, Peng 课题组以 PBDB-T 和 PTB7-Th 作为双给体,与 SFBRCN 受体材料共混,利用分子间能量转移,实现了高效率三元 OPVs 器件,器件能量转化效率达到 12.27%^[23]. 2018 年, Ge 课题组把 ITCN 加入 PBDB-T:ITIC 体系中,通过三者阶梯状的能级匹配,器件的能量转换效率 (power conversion efficiency, PCE) 达到了 12.16%^[24]. 2019 年, Chen 等^[25]以 PBDB-T 为给体, ITIC 及其衍生物 ITIF 作为双受体,通过光谱互补得到了 PCE 为 10.53% 的高效率 OPVs 器件. 近年来报道的高效率非富勒烯受体材料扩展了 OPVs 受体材料的选择范围,而如何将新材料更好地结合在一起制备更高效率的三元 OPVs 同样受到科研工作者极大关注.

本文在前人研究的基础上发现非富勒烯受体材料 Y6 和 IT-4F 在 300—1000 nm 范围内具有较好的光吸收互补特性,因此首次提出以 Y6 和 IT-4F 作为双受体材料并成功制备了高效率三元 OPV 器件. 以非富勒烯受体材料 Y6 作为第三组分,引入到以 PBDB-T-2F:IT-4F 为活性层的二元体系中,制备了吸收光谱互补的三元 OPVs 器件. 系统研究了第三组分 Y6 对 OPVs 器件效率的影响,通过优化第三组分 Y6 在活性层中的占比,实现 PCE 最高达到 12.48%,相比于二元结构 (PCE 值为 10.59%),效率提升达 17.85%.

2 实验方法

2.1 器件制备

活性层溶液配制:以氯苯为溶剂,给体材料和受体材料的质量比为 1:1,总浓度为 20 mg/mL,以体积分数为 0.5% 的 DIO 作为添加剂,在 50℃ 下搅拌过夜. Y6 作为本实验的第二受体材料,其在总受体材料中的质量分数分别为 0, 10%, 20% 和 30%.

本实验采用旋涂和真空蒸镀相结合的方法制备 OPVs 器件. 图案化导电 ITO 玻璃基板依次放入去污粉、去离子水、丙酮、异丙醇溶剂里超声 30 min,保存在干净异丙醇溶液中,留待器件制备. 将清洗干净的 ITO 玻璃在钨灯下烤干;随后将该

基板放入紫外-臭氧灯下处理 15 min,用以增加表面亲水性并提高 ITO 电极的功函数,有利于器件内各层的能级匹配,促进空穴的提取;之后在基板上旋涂 PEDOT:PSS 溶液,并以 3000 rpm 速度旋转 60 s,用以制备空穴提取层;完成旋涂后立刻将整个基板放在 130℃ 的退火台上退火 20 min,以提高空穴提取层薄膜的成膜性能;退火完成后将基板转移到充满氮气的手套箱中,手套箱内水氧含量均控制在 0.01 ppm 以下;在手套箱内旋涂提前配置好的活性层溶液 PBDB-T-2F:IT-4F:Y6($x\%$), x 为 Y6 在总受体材料中的质量占比,分别为 0, 10%, 20%, 30%,活性层完成旋涂后需在 110℃ 的退火台上退火 10 min,之后旋涂 ZnO 溶液并退火,最后转移至真空蒸镀舱内,蒸镀 100 nm 厚度的金属电极 Ag;蒸镀过程中腔体真空度保持在 5.0×10^{-4} Pa 以下.

2.2 器件表征

OPVs 器件在光照状态和暗态下的电流密度-电压曲线均由 Keithley 2400Source-Measuring Unit 测得, ABET 公司的标准太阳光模拟器 (Sun 3000) 提供光强为 AM 1.5G (100 mW/cm²) 的标准光源;外量子效率 (external quantum efficiency, EQE) 光谱则由 7-STAR Co 公司的 7-SCSpec 太阳能电池测试系统获得. 紫外分光光度计 (UV-Visspectrophotometer, U-3900H, Hitachi) 用于表征薄膜吸收谱,原子力显微镜 (AFM, Nanonavi SPA-400SPM, Japan) 用于表征加入不同比例 Y6 后活性层薄膜形貌. 掠入射小角度 X 线散射 (GISAXS) 测试在上海光源同步辐射中心完成.

3 结果与讨论

二元体系 OPVs 器件能量转换效率较低的一个主要原因是活性层给体/受体材料吸收光谱较窄,导致二元共混体异质结吸收谱对太阳光谱的覆盖率较低. 因此,在制备三元体系 OPVs 器件之前首先应考虑三元体系下活性层吸收光谱的变化. 图 1(a) 展示了本文所用三元体系中各材料本身的吸收光谱,发现 Y6 的加入可以有效弥补 PBDB-T-2F 和 IT-4F 材料在 800 nm 以上近红外区域光吸收能力. 将不同质量占比的 Y6 引入到 PBDB-T-2F:IT-4F 二元体系中,观察薄膜在可见光-近红

外范围内吸收光谱的变化. 如图 1(b) 所示, 各薄膜吸收光谱都在 632 nm 和 736 nm 处存在吸收峰值, 分别对应于薄膜主体材料 PBDB-T-2F 和 IT-4F 材料吸收峰值 [26]. 由于 Y6 在近红外区域较强的光吸收能力 [13], 随着加入 Y6 质量占比的提升, 三元薄膜在 800 nm 以上近红外区域吸收能力明显增强, 同时因为 IT-4F 质量占比的减少, 薄膜在 736 nm 吸收峰依次下降. 因此, 随着三元组分

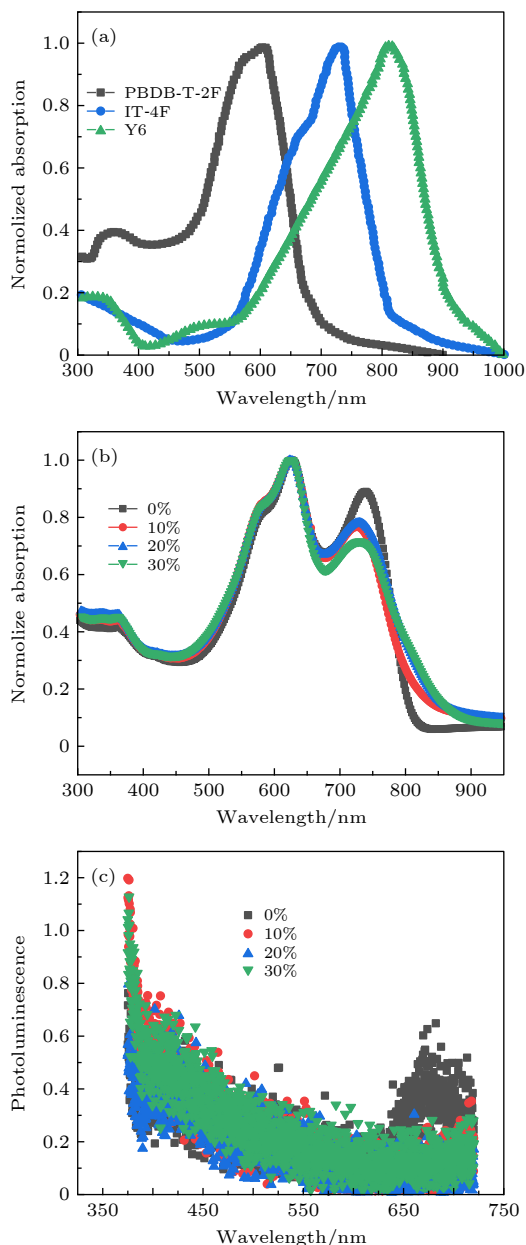


图 1 (a) PBDB-T-2F、IT-4F、Y6 薄膜吸收谱及不同 Y6 质量占比下 PBDB-T-2F:IT-4F:Y6 (xwt%) 三元体系薄膜的 (b) 吸收光谱图和 (c) 光致发光光谱

Fig. 1. (a) Absorption spectra of PBDB-T-2F, IT-4F and Y6. (b) Absorption spectra and (c) photoluminescence spectra of blended films with different concentrations of Y6.

Y6 的质量占比的增大, PBDB-T-2F: IT-4F: Y6($x\%$) 三元体系薄膜的光谱覆盖能力提升, 但同时存在 IT-4F 对应的吸收峰值下降的现象. 图 1(c) 则测试了不同 Y6 占比情况下的活性层薄膜的光致发光光谱 (PL), 由图可以看出, 在 365 nm 激发光源激发的情况下, 三元薄膜并未形成强烈的光致发光峰, 说明活性层薄膜内给体与受体之间存在较好的能量传递, 造成激子的快速解离, 从而抑制光致发光过程. 另外, 与加入第三组分 Y6 的薄膜相比, PM6: Y6 二元体系薄膜中存在 650—700 nm 之间较为明显的波峰, 而加入第三组分 Y6 后波峰消失, 说明 Y6 的加入有利于薄膜内激子解离及能量传递过程.

除了吸收光谱变化以外, 薄膜表面的粗糙度也是影响 OPVs 器件性能优劣的一个重要因素, 因此我们采用原子力显微镜 (AFM) 观察不同 Y6 质量占比情况下 PBDB-T-2F: IT-4F: Y6($x\%$) 三元体系薄膜的表面形貌, x 值分别为 0, 10, 20 和 30. 如图 2 所示, PBDB-T-2F: IT-4F 二元体系薄膜本身具有较好的形貌特征, 粗糙度均方根 (R_q) 值为 1.25 nm, 随着 Y6 质量占比依次从 10% 增大到 20%、30%, 薄膜 R_q 值, 分别从 1.63 nm 上升到 1.76 nm 和 3.69 nm. AFM 结果表明, Y6 质量占比超过 20% 时, Y6 与 PBDB-T-2F: IT-4F 不具备良好的兼容性, 不利于激子解离和电荷传输.

表面自由能作为薄膜表面特性之一, 对薄膜的多种物理化学性能及界面反应均有重要影响 [11]. 在 OPV 器件中, 活性层薄膜表面自由能大小主要影响活性层与缓冲层之间界面接触及自由电荷传输过程, 对最终器件性能具有较大影响. 本文通过测量水和乙二醇液滴的接触角计算出 PM6、Y6、IT-4F 三种薄膜的表面自由能. 如图 3 所示, PM6 和 IT-4F 薄膜的表面自由能大小分别为 55.45 mN/m 和 44.21 mN/m, 而第三组分 Y6 的自由能仅为 28.72 mN/m, 与二元体系中两种材料差距较大. 表面自由能的大小一定程度上影响三元体系薄膜成膜后的结晶化程度并最终对器件效率造成影响. 因此, 我们进一步研究了不同 Y6 质量占比对三元薄膜表面自由能的影响效果. 图 4 展示了不同三元薄膜对应的水接触角大小. 随着 Y6 质量占比从 0, 10%, 20% 到 30% 逐渐增加的过程中, 活性层对应水接触角略有变化, 分别为 100.5°、101.5°、102.5° 和 104.5°. 水接触角的变化表明对应薄膜表面润湿

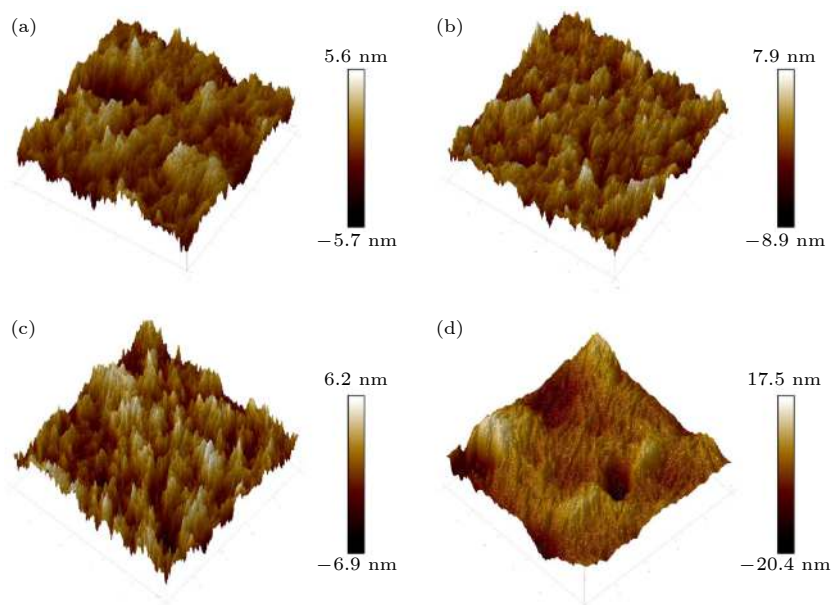


图 2 活性层 AFM 图像, 其中 Y6 质量占比分别为 (a) 0%, (b) 10%, (c) 20% 和 (d) 30%

Fig. 2. AFM images measured for active layer with different concentrations of Y6 (a) 0%, (b) 10%, (c) 20%, and (d) 30%.

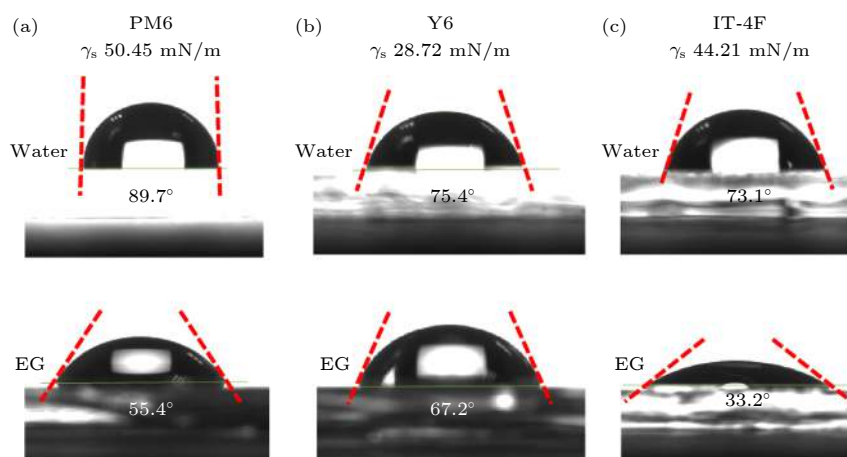


图 3 各组分薄膜水和乙二醇液滴接触角及对应表面自由能大小, (a) PM6, (b) Y6, (c) IT-4F

Fig. 3. Contact angles and corresponding surface free energies of (a) PM6, (b) Y6, (c) IT-4F.

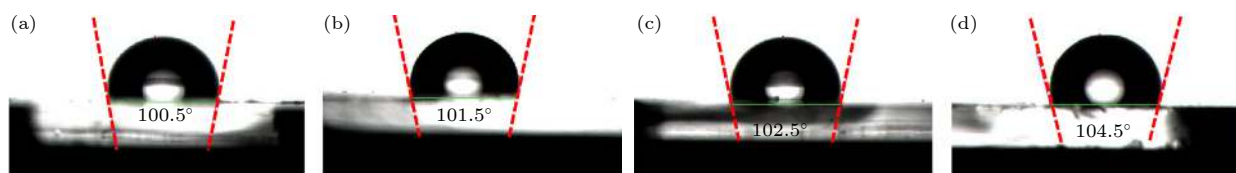


图 4 活性层薄膜水接触角测试, 其中 Y6 质量占比分别为 (a) 0%, (b) 10%, (c) 20% 和 (d) 30%

Fig. 4. Water contact angle photographs measured for active layer with different concentrations of Y6 (a) 0%, (b) 10%, (c) 20%, and (d) 30%.

性以及表面自由能的变化. 接触角测试结果表明三元组分 Y6 的加入未造成活性层润湿性的显著变化, 对器件性能的影响有限.

分别制备不同 Y6 质量占比下的三元体系 OPVs 器件. 器件 A、器件 B、器件 C 和器件 D 对

应的 Y6 占比 0%、10%、20% 和 30%. 图 5(a) 为器件结构示意图, 图 5(b) 为对应的能级图. 器件结构为 TO/PEDOT:PSS/PBDB-T-2F:IT-4F:Y6($x\%$)/ZnO/Ag (100 nm). 具体的器件参数见表 1, 相关的 $J-V$ 曲线见图 6. 结合图 6 和表 1 可以看出, 引

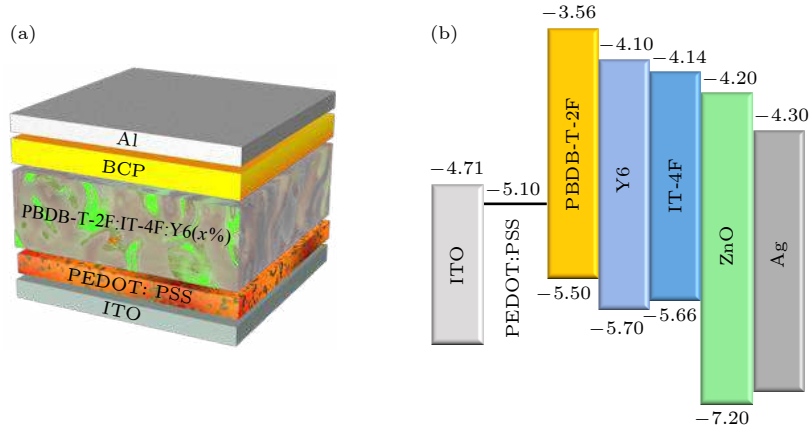


图 5 (a) 器件结构图; (b) OPVs 器件内每一层独立能级图

Fig. 5. (a) Schematic illustration of the device configuration, (b) energy diagram of individual layer in OPVs.

入三元组分 Y6 后, 器件效率明显高于二元基础器件 A, 且随着 Y6 质量占比的逐渐增高, OPVs 器件 PCE 性能呈现先上升后下降的趋势. 当 Y6 质量占比为 20% 时, 器件 PCE 最高为 12.48%, 相比二元基础器件 (PCE 为 10.59%), PCE 提升幅度达 17.85%. 然而当 Y6 质量占比继续上升至 30% 时, 器件效率反而下降至 11.82%, 这可能是由于活性层表面粗糙度增加造成的, 活性层表面粗糙度的增加会对界面激子解离及电荷传输过程造成阻碍 [27].

表 1 各 OPVs 器件性能表

Table 1. Photovoltaic parameters of different devices.

Device	V_{oc}/V	$J_{sc}/(mA \cdot cm^{-2})$	$FF/\%$	$PCE/\%$
Device A	0.82	20.49	65.22	10.59
Device B	0.82	20.76	65.21	11.05
Device C	0.83	22.09	68.45	12.48
Device D	0.82	21.63	66.43	11.82

为了研究器件效率提升的原因, 首先测试了器件外量子效率 (external quantum efficiency, EQE) 曲线, 如图 7 所示. 由 EQE 曲线可以看出, 随着 Y6 在三元体系薄膜占比的提高, 器件在波长 500 nm 附近和 800 nm 以上近红外区域均存在逐渐增强的 EQE 响应度, 而在 700 nm 附近的 EQE 响应度逐渐减小. 值得注意的是, 由前文图 1(c) 可以看出, 与加入第三组分 Y6 的活性层薄膜相比, 二元活性层薄膜在 700 nm 附近具有明显的 PL 峰, 表明其在该范围内具有相对差的能量传递及激子解离效率. 而 EQE 结果表面随着 Y6 质量占比的提高, 器件 EQE 在 700 nm 附近响应度反而

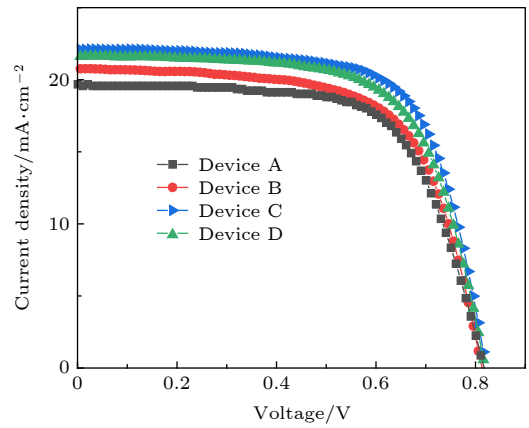


图 6 OPVs 器件的 J - V 曲线图

Fig. 6. J - V curves of OPVs devices.

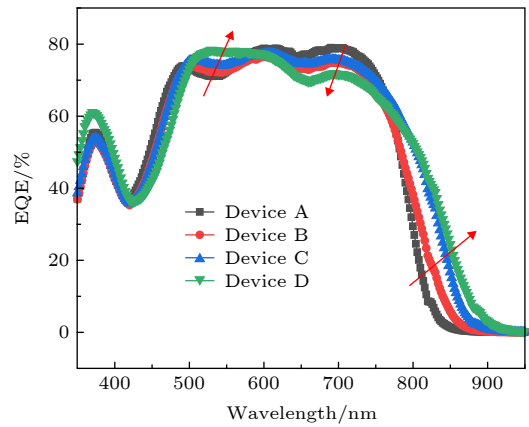


图 7 各器件对应 EQE 曲线

Fig. 7. EQE curves of OPVs device.

逐渐下降, 这是由于 IT-4F 的吸收峰值在 700 nm 附近, 而随着其在三元薄膜中的质量占比减少, 薄膜在该范围内光吸收能力降低而造成的. 同时, 由于 Y6 在 500 nm 和近红外区域存在较强的吸收峰, 随着 Y6 质量占比的提高, 对应区域存在逐渐

增强的 EQE 响应度. 结合薄膜 PL 谱与对应器件 EQE 响应曲线可以看出, 三元体系活性层光吸收能力的增强是器件性能提升的主要原因.

同时研究了 Y6 的引入对器件电学性能的影响, 我们测试了光生电流密度-有效电压曲线 (J_{ph} - V_{eff}) 以及对应的激子解离率曲线 ($P(E, T)$), 其中 J_{ph} 为器件在光照下的电流密度与暗电流密度之差, 有效电压 V_{eff} 为外加偏压与内建电压的差值, E 为电场强度, T 为环境温度. 由于有机半导体材料本身较强的激子结合能, 活性层内的光生激子并不能全部解离为自由电荷, 激子解离率的高低是决定短路电流大小的重要因素之一. 由图 7(b) 可以看出, 加入少量 Y6 (< 20%) 的三元体系器件 $P(E, T)$ 值与基础二元器件值无明显变化, 但当 Y6 质量占比继续增加时 (30%), 对应的 $P(E, T)$ 值有明显下降趋势. 该趋势与之前 AFM 表征薄膜形貌结果一致, 即当 Y6 质量占比达 30% 时, 其表面粗糙度过大, 最终造成活性层与电荷提取层界面处激子解离和电荷传输能力的降低, 也是导致器件 D 效率低于器件 C 的主要原因.

为了进一步研究器件内部载流子复合机制, 研究了不同器件短路电流 J_{sc} 随不同光强的变化趋势, 如图 8 所示. J_{sc} 与光强 (I) 之间存在指数关系 $J_{sc} \propto I^\alpha$, 指数 α 与器件内部的载流子双分子复合程度密切相关 [28]. 影响电荷复合和收集效率的因素主要包括空间电荷积累和复合以及电子/空穴迁移率不平衡等. 当器件内部电荷收集效率较高时, 几乎所有的光生载流子都能在复合前被收集时, α 值将趋近 1. 由图 8(a) 可以看出, 三元体系器件 (器件 B, 器件 C 和器件 D) 的 α 值明显高于二元体系, 这表明 Y6 引入可以有效抑制载流子双分子复合, 有利于提高器件的电荷收集效率.

另外, 通过监测开路电压 V_{oc} 与光强的变化趋势, 可以进一步了解器件内的载流子复合过程. V_{oc} 与光强之间存在对数关系:

$$V_{oc} = (1 \sim 2) \frac{kT}{q} \ln I, \quad (1)$$

其中, k 是普朗克常量, T 是温度, q 是单位电荷量. 如果电荷复合过程以单分子复合 (缺陷态) 过程为主, V_{oc} - $\ln I$ 曲线的斜率将接近 $2kT/q$, 当曲线斜率接近 kT/q 时, 表明双分子复合是器件内部电荷复合的主要复合机制. 降低缺陷态复合损耗对于提高器件的性能具有重要意义 [16]. 对 V_{oc} 和光强取对数

并进行线性拟合, 其斜率值 s 在 kT/q 和 $2kT/q$ 之间, 由图 8(b) 可以看出, 器件 A—D 对应的 s 值分别为 $1.09kT/q$, $1.43kT/q$, $1.39kT/q$ 和 $1.71kT/q$, 说明 Y6 质量占比的提高有效降低了器件内部的双分子复合损耗, 有利于器件性能的提升. 然而当 Y6 质量占比达到 30% 时, 活性层与电荷提取层界面处缺陷态复合增加, 导致器件电荷输运能力降低, 最终器件性能与 20% 器件相比有所下降.

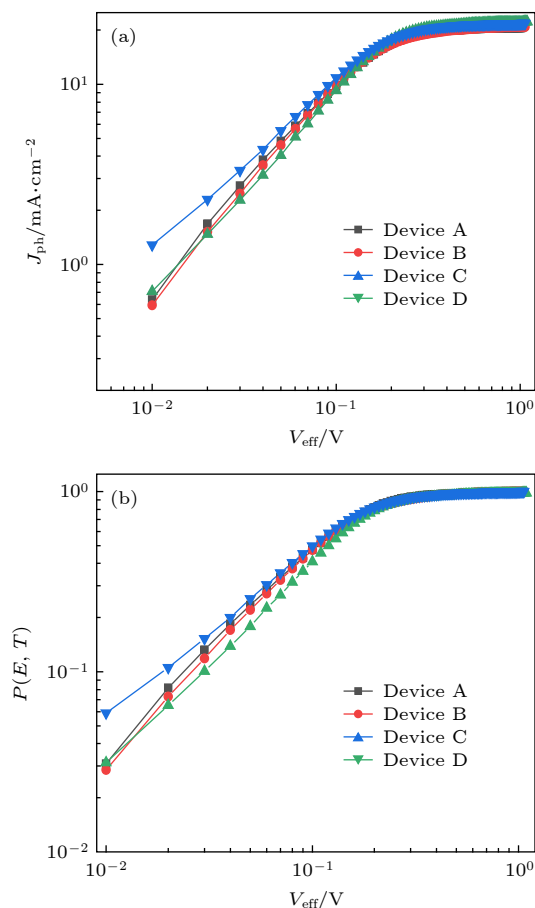


图 8 各器件对应 (a) 光生电流密度与有效电压以及 (b) 对应的激子解离率与有效电压曲线 ($T = 300$ K)

Fig. 8. (a) The photocurrent density (J_{ph}) versus the effective voltage (V_{eff}) and corresponding (b) exciton dissociation probability ($P(E, T)$) versus V_{eff} of OPVs devices ($T = 300$ K).

最后, 利用 GISAXS 技术再次表征不同 Y6 质量占比对薄膜给体/受体相分离的影响. 各薄膜的二维 GISAXS 图像及其在面内方向的一维信息如图 9 和图 10 所示. 相比二元薄膜, 引入 Y6 之后的三元薄膜 q 区散射强度明显增强, 散射强度的上升表明薄膜内存在大尺寸结构, 而大尺寸结构则源于

活性层内材料的聚集结晶, 其结果与前文 AFM 表征结果一致^[29]. 活性层中过大的聚集结晶, 减小了

给受体间接触面积的同时, 增大了电荷传输的难度, 不利于器件效率的提升.

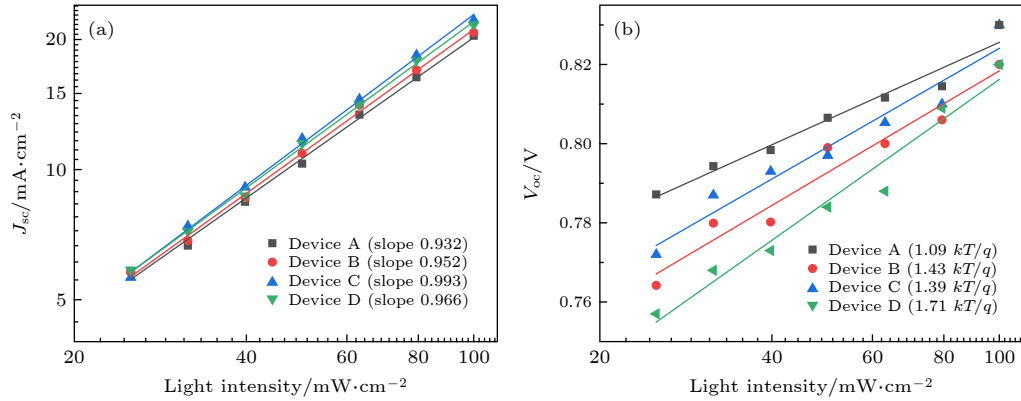


图 9 器件 A—D 对应的 (a) J_{sc} 随入射光强的变化曲线, (b) V_{oc} 随入射光强的变化曲线

Fig. 9. (a) J_{sc} and (b) V_{oc} as function of incident light intensity for the devices A, B, C, and D.

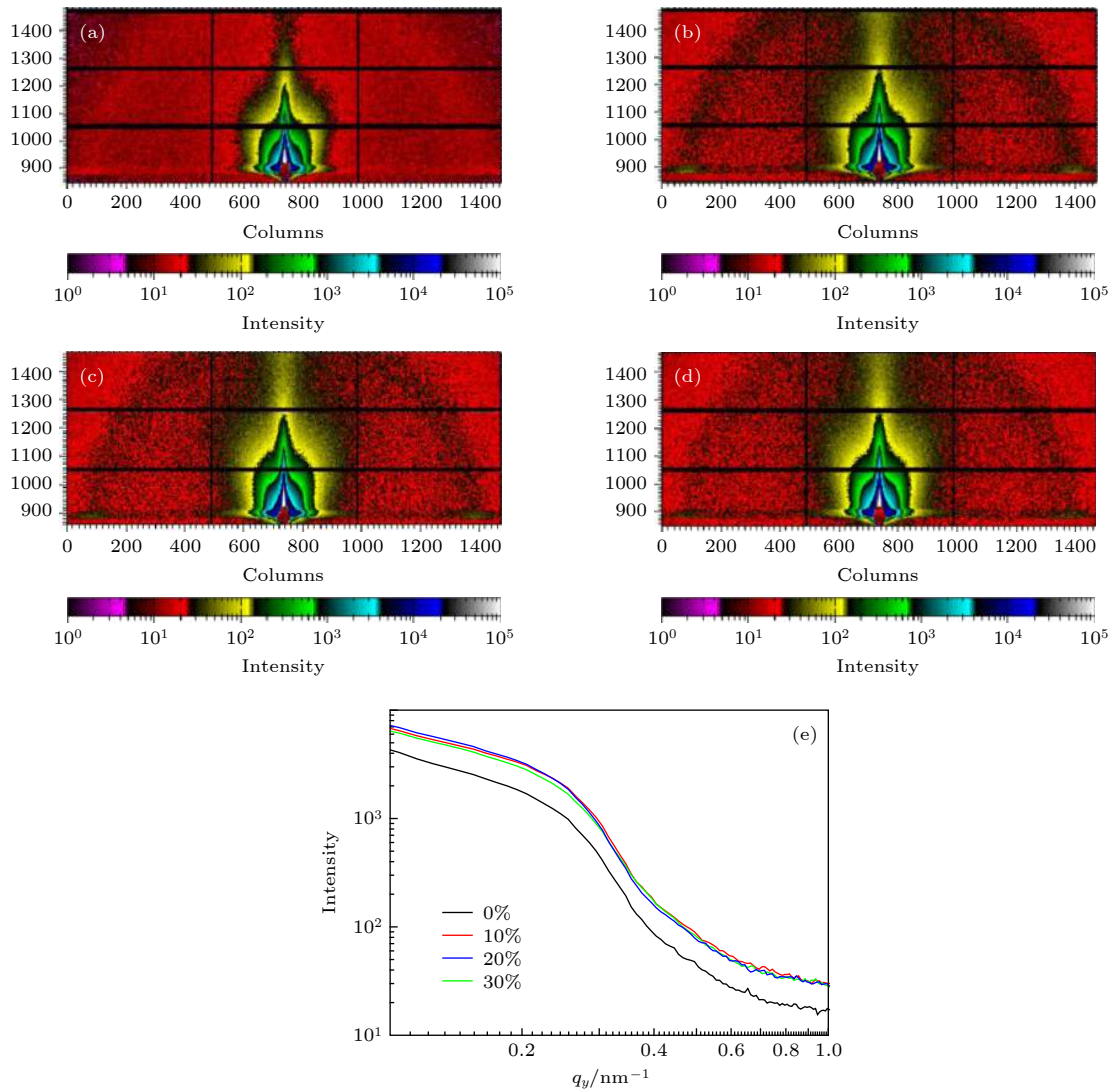


图 10 (a)—(d) 掺入不同质量占比的 Y6 后三元混合薄膜二维 GISAXS 图像和 (e) 相应的面内方向的一维曲线

Fig. 10. (a)–(d) GISAXS images of blended ternary films with different concentration of Y6, and (e) corresponding in-plane profile.

4 总 结

本文中,我们将非富勒烯受体材料 Y6 作为第三组分添加到 PBDB-T-2F:IT-4F 体异质结中制备了三元有机太阳能电池. Y6 的引入扩展了器件吸收光谱的范围,使器件在 300 nm 至 950 nm 的较宽范围内具有较强的光吸收能力,有利于器件性能的提升. 此外,实验结果显示 Y6 的引入可以有效抑制载流子复合,有利于提高器件的电荷收集效率. 通过调节 Y6 比例发现, Y6 质量占比为 20% 的三元有机太阳能电池器件具有最高的能量转换效率,达到了 12.48%,与基础二元器件 (10.59%) 相比,实现了 17.85% 的性能提升. 本文工作表明,在双非富勒烯三元有机太阳能电池构建中,不仅仅需要考虑材料吸收光谱的互补特性,器件内部能量转移及载流子复合损耗也是影响器件性能的重要因素.

参考文献

- [1] Xie J, Wang X, Wang S, Ling Z, Lian H, Liu N, Liao Y, Yang X, Qu W, Peng Y, Lan W, Wei B 2019 *Org. Electron.* **75** 105381
- [2] Sekine C, Tsubata Y, Yamada T, Kitano M, Doi S 2014 *Sci. Tech. Adv. Mat.* **15** 1468
- [3] Xu X P, Zhang G J, Li Y, Peng Q 2019 *Chin. Chem. Lett.* **30** 809
- [4] Huang L Q, Zhou L Y, Yu W, Yang D, Zhang J, Li C 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 26 (in Chinese) [黄林泉, 周玲玉, 于为, 杨栋, 张坚, 李灿 2015 物理学报 **64** 26]
- [5] Garcia A, Welch G C, Ratcliff E L, Ginley D S, Bazan G C, Olson D C 2012 *Adv. Mater.* **24** 5368
- [6] Carle J E, Krebs F C 2013 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **119** 309
- [7] Fu H T, Wang Z H, Sun Y M 2019 *Angew. Chem. Int. EDIT* **58** 4442
- [8] Zhao W, Qian D, Zhang S, Li S, Inganäs O, Gao F, Hou J 2016 *Adv. Mater.* **28** 4734
- [9] Liang Q, Han J, Song C, Yu X, Smilgies D-M, Zhao K, Liu J, Han Y 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 15610
- [10] Fan Q P, Su W Y, Wang Y, Guo B, Jiang Y F, Guo X, Liu F, Russell T P, Zhang M J, Li Y F 2018 *Sci. China. Chem.* **61** 531
- [11] Zheng Z, Hu Q, Zhang S, Zhang D, Wang J, Xie S, Wang R, Qin Y, Li W, Hong L, Liang N, Liu F, Zhang Y, Wei Z, Tang Z, Russell T P, Hou J, Zhou H 2018 *Adv. Mater.* **30** 1801801
- [12] Zhao W C, Li S S, Yao H F, Zhang S Q, Zhang Y, Yang B, Hou J H 2017 *J. Am. Chem. Soc.* **139** 7148
- [13] Yuan J, Zhang Y Q, Zhou L Y, Zhang G C, Yip H L, Lau T K, Lu X H, Zhu C, Peng H J, Johnson P A, Leclerc M, Cao Y, Ulanski J, Li Y F, Zou Y P 2019 *Joule* **3** 1140
- [14] Wang W J, Li C, Zhang M M, Gao K 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 238 (in Chinese) [王文静, 李冲, 张毛毛, 高琨 2019 物理学报 **68** 238]
- [15] Lin Y B, Adilbekova B, Firdaus Y, Yengel E, Faber H, Sajjad M, Zheng X P, Yarali E, Seitzkhan A, Bakr O M, El-Labban A, Schwingenschlogl U, Tung V, McCulloch I, Laquai F, Anthopoulos T D 2019 *Adv. Mater.* **31** 1902965
- [16] Yan T T, Song W, Huang J M, Peng R X, Huang L K, Ge Z Y 2019 *Adv. Mater.* **31** 1902210
- [17] Ratcliff E L, Zacher B, Armstrong N R 2011 *J. Phys. Chem. Lett.* **2** 1337
- [18] Wang Z, Wang Z, Wang Z, Zhao M, Zhou Y, Zhao B, Miao Y, Liu P, Hao Y, Wang H, Xu B, Wu Y, Yin S 2019 *2D Mater.* **6** 045017
- [19] Wang Z, Zhang R, Zhao M, Wang Z, Wei B, Zhang X, Feng S, Cao H, Liu P, Hao Y, Wang H, Xu B, Pennycook S J, Guo J 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 23773
- [20] Jin S Q, Xu Z, Zhao S L, Zhao J, Li Y, Deng L J 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 028801 (in Chinese) [金士琪, 徐征, 赵漫玲, 赵蛟, 李杨, 邓丽娟 2016 物理学报 **65** 028801]
- [21] Xu Z H, Chen W B, Ye W Q, Yang W F 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 218801 (in Chinese) [许中华, 陈卫兵, 叶玮琼, 杨伟丰 2014 物理学报 **63** 218801]
- [22] Xu L X, Li C, Hao X T, Gao K 2019 *Phys. Lett. A* **383** 126001
- [23] Xu X P, Bi Z Z, Ma W, Wang Z S, Choy W C H, Wu W L, Zhang G J, Li Y, Peng Q 2017 *Adv. Mater.* **29** 1704271
- [24] Jiang W G, Yu R N, Liu Z Y, Peng R X, Mi D B, Hong L, Wei Q, Hou J H, Kuang Y B, Ge Z Y 2018 *Adv. Mater.* **30** 1703005
- [25] Lv R Z, Chen D, Liao X F, Chen L, Chen Y W 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1805872
- [26] An Q S, Ma X L, Gao J H, Zhang F J 2019 *Sci. Bull.* **64** 504
- [27] Chen M, Liu D, Li W, Gurney R S, Li D, Cai J, Spooner E L K, Kilbride R C, McGettrick J D, Watson T M, Li Z, Jones R A L, Lidzey D G, Wang T 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 26194
- [28] Street R A, Davies D, Khlyabich P P, Burkhart B, Thompson B C 2013 *J. Am. Chem. Soc.* **135** 986
- [29] Bi P, Xiao T, Yang X, Niu M, Wen Z, Zhang K, Qin W, So S K, Lu G, Hao X, Liu H 2018 *Nano Energy* **46** 81

Dual non-fullerene acceptors based high efficiency ternary organic solar cells^{*}

Zhou Peng-Chao¹⁾ Zhang Wei-Dong²⁾ Gu Jia-Lu¹⁾ Chen Hui-Min¹⁾

Hu Teng-Da¹⁾ Pu Hua-Yan¹⁾ Lan Wei-Xia^{1)†} Wei Bin¹⁾

1) (*School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200444, China*)

2) (*National Key Laboratory of Science and Technology on Micro/Nano Fabrication, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China*)

(Received 27 April 2020; revised manuscript received 28 May 2020)

Abstract

Organic photovoltaics (OPVs) have been considered as one of the preliminary candidates for the third-generation solar cells due to their particularly advantages, such as light-weight, low cost, solution processability and mechanical flexibility. In recent years, the power conversion efficiency (PCE) of OPVs has achieved remarkable progress with the development of non-fullerene acceptors (NFAs), which exhibit stronger capability of light absorption and stability than the fullerene acceptors. However, the narrow absorption properties of organic materials still restrict the further breakthrough of the performance of OPVs. It is difficult for the binary heterojunction films to realize the effective wide spectrum utilization of solar energy. Ternary strategy, which consists of one donor and two acceptors or two donors and one acceptor in a bulk-heterojunction, has proven to be an effective and facile way to enhance performances of OPVs. The emergence of new NFAs such as ITIC, IT-4F, Y6 *etc.* greatly increases the selectivity of acceptors in a ternary system. It is necessary to investigate the compatibility of latest NFA materials and corresponding ternary device performance.

In this article, we report a new ternary OPV system with dual NFAs and a polymer donor. The excellent NFA material (Y6), which was first reported in 2019, is used as the third component. Different concentrations of Y6 are introduced into the binary system based on PBDB-T-2F:IT-4F. The compatibility between materials and device performances are investigated through absorption capability of blend films, AFM, water contact angle, GISAXS, and corresponding electrical properties of devices. The 12.48% PCE is achieved from ternary OPVs with PBDB-T:IT-4F as the active layers containing 20wt% Y6 in acceptors, resulting from the enhanced J_{sc} of 22.09 mA/cm², V_{oc} of 0.83 V and FF of 68.45%. The origin of the improvement of the ternary OPVs is summarized below. Firstly, an apparently complementary absorption spectrum is obtained through the introduction of Y6, which has a stronger photo harvesting capability in the spectral range from 750 to 950 nm than IT-4F, and higher short current density (J_{sc}) is observed in the ternary devices than in the binary device. Secondly, a rougher surface of the active layer is observed by increasing the Y6 concentration, which may result in an inferior exciton dissociation and charge transport process, the existence of larger-scaled crystal is proved by the GISAXS technology. Thirdly, the introduced Y6 can help to suppress the bimolecular recombination, which is in favor of the incremental device performance. Approximately 17.85% *PCE* improvement is obtained in comparison with PBDB-T-2F:IT-4F based binary OPVs.

Keywords: organic photovoltaics, ternary OPVs, non-fullerene acceptor, high efficiency

PACS: 88.40.jr, 88.40.H-, 85.60.-q, 73.50.Pz

DOI: 10.7498/aps.69.20200624

* Project supported by the Major Research Plan of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91748116) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 62005152).

† Corresponding author. E-mail: weixia_lan@shu.edu.cn