



## “功能pi-体系的分子工程”先导B专项系列报道

### --化学所在新型pi-分子材料的设计及应用上取得重要进展

2016-12-26 | 编辑：lidan | [【太虫小】](#) [【打印】](#) [【关闭】](#)

发展新型有机pi-分子材料并应用于太阳能电池、场效应晶体管 and 发光二极管等领域是有机光电子学的重要研究内容。在中国科学院战略性B类先导科技专项支持下，化学所有机固体院重点实验室的研究人员发现具有醌式增强效应的噻吩[3,4-*b*]并噻吩(TbT) (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 10357-10366) 有可能在有机光电子学领域获得广泛应用。近年来，他们在TbT选择性官能化基础上发展了一系列新型功能pi-分子材料 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 11294-11302; *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 16176-16184; *J. Mater. Chem. A* **2015**, *3*, 11194-11198)，在场效应晶体管和太阳能电池等方面展现出良好的应用前景。

相比于*p*-型有机半导体材料，空气稳定的*n*-型有机半导体材料的发展显著滞后。醌式寡聚噻吩是一种典型的*n*-型半导体材料，但在过去十多年研究中，其电子迁移率未能突破 $1.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，这可能是由于其一维分子结构限制了pi-pi堆积。研究人员设计并合成了一类二维pi-拓展醌式三噻吩2DQTT并取得了 $3.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的电子迁移率。在此基础上，研究人员继续对该分子体系的区域化学及烷基链对薄膜堆积的影响进行深入研究，发展了迁移率和开关比分别为 $5.2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 和 $10^6$ 的2DQTT-*o*-B，是目前报道的溶液加工、空气稳定*n*-型有机小分子薄膜晶体管的最大值，相关成果发表在*Adv. Mater.* **2016**, *28*, 8456-8462上。

图1 二维pi-拓展的醌式三噻吩化合物及其电子迁移率

在太阳能电池领域，研究人员基于D-A结构和醌式化两种经典策略，提出通过“增强D-A体系醌式共振”设计构建有机光伏材料的新思路。通过引入醌式化TbT功能单元，设计了新型小分子给体材料STB-n (图2a)，该类材料具有与PCBM相匹配的电子结构，通过侧链调控，小分子给体材料STB-3的光电转化效率高达9.26%，证明了该思路对于小分子给体材料设计的可行性，相关成果发表在*J. Mater. Chem. A* **2016**, *4*, 17354-17362上。与此同时，研究人员在小分子给体材料研究基础上，通过在TbT和绕丹宁上引入拉电子基团，降低化合物LUMO能级，设计了一类非富勒烯受体新材料ATT-1 (图2b)。该材料在500-800 nm范围内具有宽的光谱吸收，通过与广泛应用的给体材料PTB7-Th匹配，光电转化效率高达10.07%，相关成果发表在*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 15523-15526上。本研究表明“增强D-A体系醌式共振”策略对于有机光伏给/受体材料设计具有重要指导意义。

图2 基于TbT的新型太阳能给体 (a) 和受体 (b) 材料

有机固体院重点实验室

2016年12月26日



中国科学院化学研究所 地址：北京市海淀区中关村北一街2号 邮编：100190  
电话：010-62554001 010-62554626 传真：010-62559373 010-62569564  
京ICP备05002796号 京公网安备110402500016号