

美加速有机太阳能材料研发

从百万分子中筛选高效太阳能电池材料

目前，商用硅太阳能电池发电的成本比公用事业发电要高出10倍。为了降低太阳能电池发电成本，人们转向了有机分子材料。据美国物理学家组织网9月12日报道，哈佛大学、宾夕法尼亚哈弗福德学院和墨西哥国立自治大学研究人员推出了一项称为哈佛清洁能源计划（CEP）新计划，旨在寻找能提高光电设备效率的有机材料，将目前太阳能电池的能效水平从9.2%提高到10%到15%，寿命延长10年。符合这两个标准的话，其成本就比当前其他电源要低。最近出版的《物理化学通讯杂志》上，公布了一些前期成果，更多研究还待后续。

有机太阳能材料不仅比非有机材料更便宜，而且无危害，轻质易加工，可以做成半透明的，压成各种形状。但要从数百万的有机分子中挨个筛选，搜寻那些具备优良光电属性的材料，却好比大海捞针。

研究小组开发出一种大规模的自动化分子筛选方法。这种方法结合传统的建模方法和现代药物开发的策略，还利用了机器学习、图形识别和化学信息学技术。此外，该计划还利用了IBM世界公共网格（WCG）提供的志愿计算机，从IBM网站下载免费的无毒程序，在他们的计算机空闲的时候，用来筛选材料分子。

“大约每12小时数据库就能增添一个新分子，加速了新材料的开发。”项目领导之一、哈佛大学阿兰·埃斯博鲁-古兹克介绍说，哈佛清洁能源计划每天能找到数千个分子，目前资料库里已有1000万个分子图案可作为候选。“我们与斯坦福大学合作进行理论论证后，筛选出了8个透明化合物变种，可用作有机半导体。WCG将帮助我们找到更多有用信息。”

筛选分析采用了分级计算技术，每一步都列出所有候选分子的图形和性质，以供下一步筛选。根据初步分析，在能量水平上能满足有机太阳能电池10%或更高效率要求的仅占有所有分子的0.3%（3000个到5000个）。

哈佛大学另一位项目领导约翰尼斯·海彻曼表示，一方面，这种收集提供了一种便捷的方式，能将分子属性、电学结构和相关化合物迅速对应，不仅能用于光电设备材料的开发，还能用于其他多种用途；另一方面，也为掌握分子的结构与性质关系奠定了牢固基础。

研究人员还表示，随着今后取得更多的成果，他们即将建成一个参考数据库，为搜寻最优光电设备材料、开发有机电子设备提供有价值的信息。该数据库将于2012年开放，希望加速清洁电力能源的开发，促进其尽快达到传统能源的水平。

（来源：科技日报）

中国化工学会

2011年9月15日

[关闭]