

第七届全国分子材料与器件 学术研讨会

论文摘要集

2023年4月21-23日 中国·北京



目 录

| | | |
|---|------|----|
| 低压、高密度本征可拉伸有机光晶体管阵列及其成像应用 | 边洋爽等 | 1 |
| 基于中环策略构筑非传统结构的 OLED 新材料..... | 宾正杨 | 2 |
| 含双金属单元分子链的表面可控组装及电学性质研究 | 卜冬蕾 | 3 |
| 主客体掺杂有机室温磷光材料..... | 蔡政旭 | 4 |
| 多重共振热活化延迟荧光材料的设计、合成及应用研究 | 曹啸松 | 5 |
| Disorder-driven high doping efficiency in N-type fullerene-based organic thermoelectrics | | |
| with polar side chains..... | 曾艳等 | 6 |
| 拓扑共轭材料及其共轭自由基性质 | 曾泽兵 | 7 |
| 不对称受体分子的设计及其高效光伏器件 | 陈红征等 | 8 |
| 芳香二酮衍生的高迁移率有机/聚合物半导体 | 陈华杰等 | 9 |
| 面向神经形态显示的有机晶体管 | 陈惠鹏 | 10 |
| 吡啶并三氮唑类聚合物半导体实现高迁移率与近红外发光集成 | 陈金佯等 | 11 |
| 二维共轭高分子材料与器件 | 陈龙 | 12 |
| 片状聚乙烯单晶的本征介电性能 | 陈敏等 | 13 |
| 钙钛矿材料与器件的异质性 | 陈棋 | 14 |
| 锯齿型边缘稠环芳烃的合成与受激辐射特性 | 陈强 | 15 |
| 有机长余辉材料发光机理与应用 | 陈润锋 | 16 |
| 拓展卟啉化合物的表面精准合成及电子性质研究 | 陈婷 | 17 |
| 柔性聚合物太阳电池集成设计与印刷工艺 | 陈义旺 | 18 |
| 离子液体钙钛矿光伏电池..... | 陈永华 | 19 |
| 协同掺杂效应在非富勒烯太阳能电池中的应用 | 陈智慧等 | 20 |
| 碳硼烷桥联 OPE 分子结的设计合成及导电性质研究..... | 陈忠洋等 | 21 |
| 简单策略辅助光活性层实现高效有机太阳能电池 | 湛烈等 | 22 |
| 基于功能性第三组分的有机太阳能电池 | 程沛 | 23 |
| 刺激响应性有机发光材料的设计合成及其应用研究 | 池振国等 | 24 |
| 直接芳基化缩聚合成高迁移率共轭聚合物 | 邓云峰 | 25 |
| 高性能有机热电材料：从精准掺杂到器件功能化 | 狄重安 | 26 |
| 聚合物复合电解质与固态电池性能研究 | 丁书江等 | 27 |
| 分子自旋电子器件中的双极化子输运与磁场效应研究 | 丁帅帅等 | 28 |
| 有机/杂化激光材料与器件 | 董海云 | 29 |
| 高迁移率发光有机高分子半导体材料与器件 | 董焕丽等 | 30 |
| 二维材料可控生长及物性调控的理论研究 | 董际臣等 | 31 |
| 含硼分子碳及其超分子 | 窦传冬等 | 32 |
| Indole-Fused BN-Heteroarenes as Narrowband Blue Emitters for Organic Light-Emitting Diodes | | |

| | | |
|--|------|----|
| | 杜呈卓等 | 33 |
| 金属表面功能分子反应选择性机制研究 | 杜世萱 | 34 |
| 高性能低成本有机太阳能电池关键材料研究 | 段春晖 | 35 |
| 基于热活化敏化荧光 (TSF) 的广色域 OLED..... | 段炼 | 36 |
| 高效本征态荧光碳量子点用于电致发光二极管 | 范楼珍 | 37 |
| 氰基化 n-型高分子的构筑及性能研究..... | 冯奎等 | 38 |
| A Top-down Strategy to Engineer Active Layer Morphology for Highly Efficient and Stable | | |
| All-polymer Solar Cells..... | | |
| | 付慧婷等 | 39 |
| 氧化石墨烯基宏观材料及光电子器件 | 高超等 | 40 |
| Transition metal complex for hybrid graphene molecular junctions..... | 高廷威等 | 41 |
| 基于萘的有机共轭分子材料研究 | 高希珂 | 42 |
| 锡基钙钛矿在室内光伏方面的应用 | 高震等 | 43 |
| 二噻吩并蒽二酰亚胺类有机半导体材料设计合成与光电功能研究 | 葛从伍等 | 44 |
| 高效率有机太阳能电池研究 | 葛子义等 | 45 |
| 用于多级解码模式的超低功耗有机垂直晶体管 | 耿德超等 | 46 |
| A Novel Strategy toward Thermally Activated Delayed Fluorescence from A Locally Excited State | | |
| | 耿华等 | 47 |
| From TADF single crystal laser to phosphorescent thin film OLEDs..... | 宫浩等 | 48 |
| 高效热活化延迟荧光材料与器件 | 龚少龙等 | 49 |
| 二聚化电子受体的构象调控实现高效、稳定和低成本损失的有机太阳能电池..... | 古晓斌等 | 50 |
| 有机/高分子光功能材料的聚集态结构设计和激发态性质调控 | 顾星桂 | 51 |
| 多材料智能打印柔性电子器件 | 郭双壮 | 52 |
| High-Performance n-Type Polymer Semiconductors for Organic Electronics..... | | |
| | 郭旭岗 | 53 |
| 本征柔性材料与光电器件研究 | 郭云龙 | 54 |
| 有机光伏受体材料分子堆积与电子传输的理论模拟 | 韩广超等 | 55 |
| Control over Solution Phase Structure and Thin Film Morphology for High Performance | | |
| Conjugated Polymers | | |
| | 韩艳春等 | 56 |
| 二维有机材料与器件 | 何道伟等 | 57 |
| 基于非共价相互作用的功能有机共轭材料体系 | 何凤 | 58 |
| 功能分子配位在钙钛矿光伏电池中的应用 | 何祝兵 | 59 |
| 光控主动适应型有机晶体管的构筑及性能研究 | 贺紫等 | 60 |
| 有机光伏材料与器件近期进展 | 侯剑辉 | 61 |
| 分子调控与高效稳定的全无机钙钛矿电池 | 胡劲松 | 62 |
| 基于机器人安全控制的电子皮肤器件阵列 | 胡平安等 | 63 |
| 印刷制备柔性可穿戴光伏器件 | 胡笑添 | 64 |

| | | |
|--|------|----|
| 有机半导体掺杂研究..... | 胡袁源 | 65 |
| 具备超高导电率的可溶液加工 n 型导电聚合物的制备 | 黄飞 | 66 |
| 层状正极材料的界面结构设计 with 高电压特性研究 | 黄富强等 | 67 |
| 无铅锡基卤化物钙钛矿的结晶动力学调控研究 | 黄俊杰等 | 68 |
| 表界面调控构筑高性能有机传感器 | 黄丽珍等 | 69 |
| 具有神经形态的智能传感器 | 黄伟国 | 70 |
| 结晶性光伏材料聚集与形貌调控研究 | 霍利军 | 71 |
| 手性共轭分子材料 | 姜玮 | 72 |
| 基于有机电化学晶体管的葡萄糖传感器制备与性能优化 | 姜紫灵等 | 73 |
| 功能螺环分子的构筑与应用 | 蒋佐权 | 74 |
| 基于有机半导体单晶的高性能线性偏振光发射与探测器件 | 揭建胜等 | 75 |
| 有机光电材料结构与性能 | 解增旗 | 76 |
| Interface Defects Tuning in Polymer-Perovskite Phototransistors for Visual Synapse and Adaptation Functions | 匡俊华等 | 77 |
| High Crystalline Single Layer Two-dimensional Covalent-Organic Frameworks Film for Flexible Nonvolatile Resistance Memory | 雷圣宾等 | 78 |
| 半透明有机光伏电池与材料 | 李昌治 | 79 |
| High areal loading 2D titanium carbide electrochemical capacitor with hierarchical pore structure | 李春等 | 80 |
| Energy transfer between Singlet, triplet and doublet | 李峰 | 81 |
| 稳定超级苯醌的合成及其光电磁学性能 | 李光武 | 82 |
| 北京同步辐射装置 1W1A 线站掠入射实验方法及其在共轭聚合物凝聚态结构表征的应用 | 李鸿祥等 | 83 |
| 液栅石墨烯晶体管传感器在健康监测中的应用研究 | 李金华等 | 84 |
| 有机半导体的失稳机制与增稳策略研究 | 李立强 | 85 |
| 多级结构偏振敏感光探测器 | 李明珠 | 86 |
| 分子聚集态的光功能特性调控 | 李倩倩 | 87 |
| 界面结晶与二维分子晶体 | 李荣金等 | 88 |
| Unraveling the Stretch-Induced Microstructural Evolution and Morphology–Stretchability Relationships of High-Performance Ternary Organic Photovoltaic Blends | 李赛萌等 | 89 |
| 链接小分子受体同时提升聚合物太阳能电池的效率及稳定性 | 李尚宇等 | 90 |
| 新型偶氮光开关分子的设计合成及应用 | 李涛 | 91 |
| 基于硼氮萘的高性能有机光电材料 | 李琬卉等 | 92 |
| 近红外单组分有机太阳能电池 | 李韦伟 | 93 |
| 有机太阳能电池光生载流子产生动力学研究 | 李伟 | 94 |

| | | |
|---|------|-----|
| 可溶液印刷高效大面积柔性有机太阳能电池 | 李耀文 | 95 |
| 具有增强光敏作用的阴离子型花青 J 聚集纳米粒子, 用于线粒体靶向肿瘤光治疗 | 李奕彬等 | 96 |
| 稳定的“给体-受体”型有机自由基半导体的设计、合成与应用研究 | 李远 | 97 |
| 从单个分子到分子聚集态科学 | 李振 | 98 |
| 荧蒽功能分子设计合成及性能研究 | 李忠安 | 99 |
| 高性能 OLED 材料、器件及制造装备 | 廖良生 | 100 |
| 有机低维晶体激光及光子性质调控 | 廖清 | 101 |
| 有机光伏催化析氢 | 林禹泽 | 102 |
| 功能复合材料的跨界面热输运机制研究 | 林悦等 | 103 |
| Investigation Ferrocene Derivatives in 2D Material Contacted Single Molecular Junction | 刘畅等 | 104 |
| 有机场效应薄膜器件集成的模型与实验 | 刘川 | 105 |
| 基于芴的高迁移率发光有机半导体材料和器件 | 刘单等 | 106 |
| 具有自调控效应的非富勒烯受体材料及高性能有机太阳能电池 | 刘峰等 | 107 |
| 高效率双纤维有机薄膜光伏电池 | 刘烽等 | 108 |
| 超低功耗的人工神经突触器件 | 刘国才等 | 109 |
| 硼氮配位键 n 型有机小分子 | 刘俊 | 110 |
| 无定形 n 型高分子半导体 | 刘俊等 | 111 |
| 聚集抑制的混合策略实现高性能有机-量子点复合太阳能电池 | 刘俊伟等 | 112 |
| Molecular Orientation-Induced Polarization Filtering based on Organic Heterostructures | 刘坤等 | 113 |
| 高性能锡基钙钛矿光电探测器用于心率检测 | 刘天华等 | 114 |
| 印刷制备顶接触有机薄膜晶体管阵列研究 | 刘旭影 | 115 |
| 基于不对称结构的高效红光有机发光二极管 | 刘艳艳等 | 116 |
| 界面设计提升有机太阳能电池性能 | 刘瑶 | 117 |
| 高效低维钙钛矿太阳能电池 | 刘永胜 | 118 |
| 高迁移率有机半导体——从带状稠环芳烃到环状稠合芳烃 | 陆雪峰等 | 119 |
| 富勒烯聚合物在锡基钙钛矿器件中的应用 | 罗利平等 | 120 |
| 单分子光谱成像与谱学反演 | 罗毅 | 121 |
| Concentration Recognition of Gas Sensor with Organic Field-Effect Transistor Assisted by Artificial Intelligence | 吕爱凤等 | 122 |
| 有机光伏的结晶性与能量损失控制 | 吕琨 | 123 |
| 低维碳纳米复合物阴极界面材料及其光伏性能研究 | 吕梦岚 | 124 |
| 基于富勒烯电子传输层的高效稳定全聚合物太阳电池 | 吕明升等 | 125 |
| 有机嵌段结构纳米线的宏量制备及其光子学功能研究 | 吕强等 | 126 |
| Low Voltage Organic Area-Emitting Transistor | 马超凡 | 127 |
| 热激子与高效 OLEDs | 马东阁 | 128 |

| | | |
|---|------|-----|
| 氰基乙酸供体-受体化合物对钙钛矿的表面钝化和二次结晶调控 | 马东羽等 | 129 |
| 有机半导体中光谱与超快动力学过程的理论研究 | 马海波 | 130 |
| 大面积印刷有机光伏器件的原位形貌调控 | 马伟 | 131 |
| Structurally Nontraditional Bipolar Hosts for RGB Phosphorescent OLEDs: Boosted by a “Butterfly-Shaped” Medium-Ring Acceptor | 马蔚欣等 | 132 |
| 烷基侧链对称性与有机半导体器件性能与应用关系研究 | 马晓颖等 | 133 |
| 共轭骨架无 sp 碳类稠环电子受体的分子堆积和取向行为调控 | 马云龙等 | 134 |
| 基于共平面电极的交流驱动的电致发光器件 | 孟鸿等 | 135 |
| 无铅锡基钙钛矿太阳能电池 | 孟祥悦 | 136 |
| 非富勒烯有机光伏器件中实现反转单重态和三重态电荷转移态的设计规则 | 苗晓丹等 | 137 |
| Balancing the Efficiency, Stability, and Cost Potential for Organic Solar Cells via A New Figure of Merit | 闵杰 | 138 |
| 锡基钙钛矿光电转换材料与器件 | 宁志军等 | 139 |
| 范德华多层异质结制备低压有机 RGB 面发光晶体管阵列 | 潘志超等 | 140 |
| 基于二维有机单晶的柔性晶体管及电路 | 彭博宇等 | 141 |
| 全柔性织物显示系统 | 彭慧胜 | 142 |
| 有机激光探索 | 彭俊彪等 | 143 |
| 有机太阳能电池关键材料与器件研究 | 彭强 | 144 |
| 新型螺旋手性分子构筑单元的设计与合成 | 齐婷等 | 145 |
| 具有强红光发射的方酸菁 AIE 荧光探针用于次氯酸根的检测 | 乔伟国等 | 146 |
| 气泡辅助功能材料高精度图案化 | 乔雅丽等 | 147 |
| 基于四苯基苯的 AIE 材料制备及其在深蓝光非掺杂 OLED 中的应用 | 秦安军 | 148 |
| 有机/无机杂化半导体激光器件 | 秦川江 | 149 |
| 反射/荧光双重模式胆甾相液晶的图案化 | 秦朗等 | 150 |
| 可光编程的圆偏振光探测器 | 邱龙臻等 | 151 |
| 具有可控扭曲骨架的异构双噻吩酰亚胺(iBTI)受体的合成与衍生 | 屈敦帅等 | 152 |
| 2D-COF 节点扭曲调制策略用于可编程长余辉发射 | 邵明超等 | 153 |
| 宏观超分子组装及其应用 | 石峰 | 154 |
| 交替共轭聚合物的精准合成 | 史钦钦等 | 155 |
| n-型全受体聚合物的设计、合成及性能研究 | 史永强 | 156 |
| 有机/高分子聚集体的光电性质理论研究 | 帅志刚 | 157 |
| 四噻吩有机光伏受体材料 | 宋金生 | 158 |
| 利用工艺助剂定向精准调控 BTP 系列受体及其 有机太阳能电池研究 | 宋欣等 | 159 |
| 纳米绿色印刷光电器件 | 宋延林 | 160 |
| 有机金属分子材料的限域发光与偶合 | 苏成勇等 | 161 |

| | | |
|---|------|-----|
| 纳米印刷智能材料器件 | 苏萌 | 162 |
| 纯有机室温电致磷光 | 苏仕健等 | 163 |
| 无铅卤化物钙钛矿光电突触器件的研究 | 孙昌族等 | 164 |
| 多孔骨架复合物材料激发态调控和光催化活性研究 | 孙春义等 | 165 |
| 双噻吩酰亚胺基 n-型高分子光伏材料 | 孙会靓 | 166 |
| 染料敏化太阳能电池器件模拟与染料分子设计 | 孙磊等 | 167 |
| 高效自旋输运型有机半导体研究 | 孙向南 | 168 |
| 高性能全聚合物太阳能电池研究 | 孙艳明 | 169 |
| 分子基反铁电体的设计合成与性能研究 | 孙志华 | 170 |
| 纳米器件界面修复与增韧 | 谈利承等 | 171 |
| 基于 SnO ₂ 阴极界面材料的反向结构有机太阳电池 | 谭占鳌等 | 172 |
| 新型延迟荧光材料设计及白光应用 | 唐建新等 | 173 |
| 极限探测用卤化物晶体生长及探测性能研究 | 陶绪堂等 | 174 |
| 基于螺吡喃衍生物的有机固态荧光光开关 | 田文晶 | 175 |
| 高效率高稳定性有机光伏器件与模组制备研究 | 万相见等 | 176 |
| 三维共价有机框架材料 | 汪成等 | 177 |
| 酰亚胺功能化的分子碳 | 王朝晖 | 178 |
| 爱丁堡仪器稳态瞬态荧光产品高端附件耦合及应用 | 王晨晨 | 179 |
| 高导电性共轭配位聚合物材料 | 王成亮 | 180 |
| 用于超灵敏电生理信号的低压本征可拉伸有机晶体管放大器 | 王成戔等 | 181 |
| 富勒烯的制备与应用 | 王春儒等 | 182 |
| 二维共价有机框架薄膜的合成与光电功能 | 王栋 | 183 |
| 基于翻转 C-H 活化策略高效构筑蓝光有机发光二极管主体材料 | 王菲等 | 184 |
| 智能化有机光电器件 | 王翰林 | 185 |
| 立体异构调控的 AIEgens 组装和发光机理的理论研究 | 王慧等 | 186 |
| 锡基钙钛矿发光 | 王建浦 | 187 |
| 锡基钙钛矿晶体生长机制研究 | 王军方等 | 188 |
| 空间电荷转移高分子荧光材料 | 王利祥 | 189 |
| 复杂分子系统的大尺度动力学模拟 | 王林军 | 190 |
| 导电高分子生物传感与生物医药研究 | 王树 | 191 |
| 金属富勒烯的电子自旋与分子磁性 | 王太山 | 192 |
| 有机太阳能电池分子聚集体调控及器件研究 | 王涛 | 193 |
| 稠杂芳烃分子材料与光电性质 | 王小野 | 194 |
| 无铅卤化物双钙钛矿光电器件的研究 | 王煦等 | 195 |
| 近红外有机晶体发光和激光 | 王雪东 | 196 |

| | | |
|---|------|-----|
| 高迁移率 n 型聚合物半导体 | 王洋等 | 197 |
| 有机超分子本征可拉伸光电材料与器件 | 王以轩等 | 198 |
| 高性能钙钛矿半导体室内光伏器件 | 王照奎 | 199 |
| 二维场效应晶体管传感器及生化检测 | 魏大程 | 200 |
| 基于二维层状半导体的偏振光探测器 | 魏钟鸣 | 201 |
| 通过调节硫族元素获得有效近红外二区 I 型光敏剂 用于光热/光动力治疗 | 温凯凯等 | 202 |
| Neurosynaptic transistor for human visual system..... | 文巍等 | 203 |
| 不对称外围锁增强手性硼氮螺烯类圆偏振多重共振 TADF 材料 | 吴秀刚等 | 204 |
| 有机空穴传输材料及光伏应用 | 吴永真等 | 205 |
| 二维材料基微型储能器件 | 吴忠帅 | 206 |
| 碳龙骨架 - 具有 $d\pi-p\pi$ 共轭的芳香性分子结构基元..... | 夏海平 | 207 |
| Highly efficient electron-transporting materials for OLEDs..... | 肖立新等 | 208 |
| 溶液加工有机发光和感光器件 | 谢国华等 | 209 |
| 有机太阳能电池功能层印刷制备和模组研究 | 谢志元 | 210 |
| 从理论角度看扫描隧道显微镜对表面物种的标定 | 徐昕等 | 211 |
| Comprehensive scan for nonmagnetic Weyl semimetals with nonlinear optical response..... | 许秋楠等 | 212 |
| Interface terminal group regulated organic phototransistors with | 薛娣等 | 213 |
| 面向物联网系统供能的室内光伏电池 | 薛丁江 | 214 |
| 新型非掺杂空穴传输材料实现高效稳定钙钛矿太阳能电池 | 薛启帆等 | 215 |
| 长余辉发光配合物研究 | 闫东鹏 | 216 |
| 有机微纳激光中的三重态损耗抑制 | 闫永丽等 | 217 |
| 富勒烯异构体对锡基钙钛矿太阳能电池性能的影响 | 杨成林等 | 218 |
| 窄光谱有机发光材料及器件 | 杨楚罗等 | 219 |
| 面向柔性电子的有机晶态材料 | 杨方旭 | 220 |
| 赋予咪唑聚集诱导荧光和热活化延迟荧光性质, 用于高效率非掺杂有机发光二极管..... | 杨阁等 | 221 |
| 高迁移率可拉伸有机场效应晶体管器件 | 杨辉 | 222 |
| 基于密度泛函分子设计的复合材料电极稳定性预测 | 杨露茜等 | 223 |
| 富勒烯基光电功能材料 | 杨上峰 | 224 |
| Stability of A-D-A non-fullerene acceptors: Molecular insight into the photoisomerization of the dihedral angles..... | 杨苏玉等 | 225 |
| X 射线激发分子的光物理机制、激发态调控及其在 多(高)能谱 X 射线成像中的应用探索 | 杨旻等 | 226 |
| High mobility and high luminescence single crystal materials and devices..... | 杨昭等 | 227 |
| 分子静电势及高效率有机光伏材料设计 | 姚惠峰 | 228 |
| 聚合物光伏共混体系的薄膜微结构与力学性能研究 | 叶龙等 | 229 |

| | | |
|--|------|-----|
| 分子组装构筑响应型光功能材料 | 易涛等 | 230 |
| 高效有机光伏电池电子过程的理论研究 | 易院平 | 231 |
| 高性能钙钛矿半导体太阳能电池及发光二极管 | 游经碧 | 232 |
| 高迁移率聚合物半导体材料与器件 | 于贵 | 233 |
| 分子尺度的非相干电荷传递与分子器件 | 于曦 | 234 |
| 具有形状记忆功能的光致形变液晶高分子 | 俞燕蕾等 | 235 |
| 准梯型聚合物发光场效应晶体管 | 袁达飞 | 236 |
| 有机-纳米晶杂化太阳能电池 | 袁建宇 | 237 |
| 非典型发光化合物及其发光调节 | 袁望章 | 238 |
| 有机电化学晶体管材料与器件 | 岳晚等 | 239 |
| 共轭单分子电荷输运性质调控研究 | 臧亚萍 | 240 |
| 稠环电子受体光伏材料 | 占肖卫 | 241 |
| Energy Alignment on the Hole-Transport Materials for Perovskite Solar Cells | 张斌 | 242 |
| 有机半导体形貌调控的动力学用于药物释放研究 | 张博雅等 | 243 |
| 分子材料磁场效应与自旋调控 | 张闯 | 244 |
| 有机复合材料微纳激光 | 张春焕 | 245 |
| 杂原子嵌入调控的二维 <i>sp</i> -碳连接晶态共轭聚合物 | 张帆 | 246 |
| 倍增型有机光电探测研究进展 | 张福俊 | 247 |
| 基于茈萘二酰亚胺 PyDI 的新型有机半导体材料 | 张浩力 | 248 |
| 有机光伏材料聚集态结构调控优化器件性能 | 张茂杰 | 249 |
| 共振辅助氢键在有机半导体材料中的应用 | 张清等 | 250 |
| Application of the “noncovalently conformational locks” strategy in the design of organic photovoltaic materials | 张昕等 | 251 |
| 茈萘二酰亚胺基阴极界面材料 | 张雅敏等 | 252 |
| 高量子产率碳量子点的设计合成及在量子点发光二极管中的应用 | 张洋等 | 253 |
| Super-Exchange Couplings in Polymerized Small Molecule Acceptors Enable High-Efficiency All-Polymer Solar Cells | 张要刚等 | 254 |
| 受体小分子的合成及器件 | 张有地等 | 255 |
| 高效率有机太阳能电池的填充因子研究 | 张渊等 | 256 |
| 受体光伏材料的设计与低成本合成 | 张志国 | 257 |
| 协同掺杂效应在非富勒烯太阳能电池中的应用 | 陈智慧等 | 258 |
| 聚合小分子受体在全小分子有机太阳能电池中的界面调节作用 | 张子祺等 | 259 |
| 基于有机场效应晶体管的丙酮传感研究 | 赵皓臻等 | 260 |
| 有机半导体聚集态结构与柔性器件性能研究 | 赵岩 | 261 |
| 高效稳定 Cs 基钙钛矿的化学创制 | 赵一新 | 262 |

| | | |
|--|------|-----|
| 有机功能材料光物理过程中的量子相干现象 | 赵仪 | 263 |
| 葫芦[7]脲对以亮氨酸为 N-端的三肽选择性识别的理论研究 | 赵盈等 | 264 |
| 有机微纳激光材料与器件 | 赵永生 | 265 |
| 二维聚合富勒烯 | 郑健 | 266 |
| Solution-processable through-space charge-transfer emitters via solubilizing groups modification | 郑琦等 | 267 |
| 含梯形稠环半导体材料与器件 | 郑庆东等 | 268 |
| 有机光伏 A-D-A 非富勒烯小分子受体取向的调控: 端基 π - π 堆积的作用 | 郑文玉等 | 269 |
| 非共价组装体结构和发光过程的理论模拟 | 郑小燕 | 270 |
| 半满电子态在自由基单分子电输运中的角色 | 郑永豪 | 271 |
| 富勒烯聚合物在锡基钙钛矿器件中的应用 | 支鸿富等 | 272 |
| 基于有机场效应晶体管的柔性乳酸传感器的制备与性能研究 | 职丹凤等 | 273 |
| 钙钛矿量子点的原位制备与集成应用研究 | 钟海政 | 274 |
| 含氟材料与氟碳溶剂的光电应用 | 钟洪亮 | 275 |
| 光功能分子晶体的制备与性能 | 钟羽武 | 276 |
| 钙钛矿材料的生长及光电器件 | 周欢萍 | 277 |
| 溶液法光伏器件的界面研究 | 周惠琼 | 278 |
| 揭示全聚合物光伏电池中薄膜微观结构, 力学性能和相容性之间的相关性 | 周康康等 | 279 |
| 醇相 PEDOT 及在全印刷有机光伏电池的应用 | 周印华等 | 280 |
| 高效率深蓝光晶态有机发光二极管 | 朱峰等 | 281 |
| 有机热电转换过程的运输机制与性能预测 | 朱嘉等 | 282 |
| 多卤策略用于平衡双极性晶体管及高增益反相器 | 朱明亮等 | 283 |
| 微量卤化铵辅助优化策略提升钙钛矿太阳能电池光伏性能 | 朱瑞 | 284 |
| 光敏材料与光控超结构 | 朱为宏 | 285 |
| 高效有机光伏给体材料的分子设计与性能调控 | 朱卫国等 | 286 |
| 1,10-菲咯啉衍生物的合成制备及其在光电器件中的应用 | 朱旭辉 | 287 |
| Application of organic field-effect transistor in memory | 朱志恒等 | 288 |
| 尺寸匹配的二羧酸分子修饰钙钛矿太阳能电池的埋底界面 | 庄旭晖等 | 289 |
| 钙钛矿材料的固相合成及高质量钙钛矿薄膜的磁控溅射沉积 | 邹德春 | 290 |

低压、高密度本征可拉伸有机光晶体管阵列及其成像应用

边洋爽^{1,2}, 刘云圻^{1,2}, 郭云龙^{1,2,*}

¹中国科学院化学研究所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

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn

柔性光电探测及成像技术对于发展下一代生物电子器件至关重要, 包括可穿戴和可植入监测设备、先进的医疗成像系统以及智能仿生机器人等。可拉伸有机电子器件具有类皮肤特性、功能可调性和可大面积加工等优势, 获得了学术界和工业界的广泛关注。然而, 目前可拉伸有机光电器件的制备需要复杂的分子设计和制造工艺, 难以兼顾高集成度、多功能性和操作稳定性。在这里, 我们展示了一种制备高密度本征可拉伸有机光晶体管阵列的策略, 并将其进一步应用于 X 射线探测及成像。所制备的本征可拉伸有机光晶体管在短沟道($L/W=2/8\mu\text{m}$)下, 表现出高的迁移率($0.44\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$)、理想的阈值电压($\sim 0\text{V}$)以及高的开关比 ($I_{\text{on}}/I_{\text{off}}\sim 10^6$)。同时, 基于本征可拉伸有机光晶体管的 X 射线探测阵列实现了高的像素密度 ($41,000/\text{cm}^2$)、超高的灵敏度($3.15\times 10^8\ \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1}\text{ cm}^{-2}$)和低的工作电压(5V)。此外, 我们首次实现了基于本征可拉伸有机光电器件的高分辨率 X 射线成像, 这为发展下一代可扩展数字成像技术提供了可能。

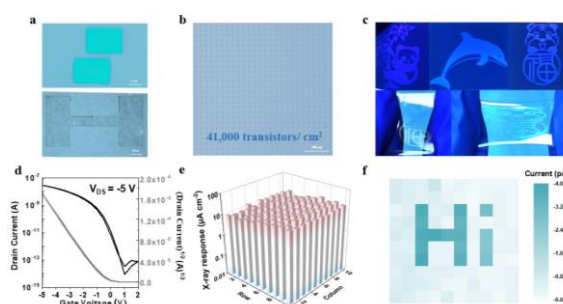


Fig. 1 Low-voltage high-density intrinsically stretchable organic phototransistor array for X-ray detection and imaging.

关键词: 本征可拉伸; 有机光晶体管阵列; 高密度; 高分辨成像

参考文献

[1] Bian, Y., Liu, K., Liu, Y. Q., Guo Y. L.* *Nat. Commun.* **2022**, **13**, 7163.

[2] Bian, Y., Liu, K., Guo Y. L.*, Liu, Y. Q.* *Acta Chim. Sinica* **2020**, **78(9)**, 848-864.

基于中环策略构筑非传统结构的 OLED 新材料

宾正杨*

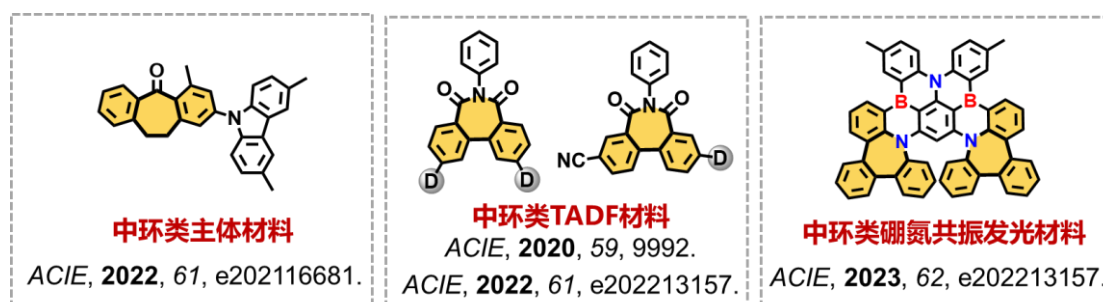
四川大学化学学院，四川省成都市武侯区四川大学望江校区，610064

*Email: binzhengyang@scu.edu.cn

传统的 OLED 材料的中心骨架通常具有柔性非环结构或刚性环状平面结构。对于非环结构，分子内基团的自由旋转将不可避免地产生能量耗散，从而降低分子的发光效率；而对于环状平面结构，其刚性平面的特点容易导致分子之间的紧密 π - π 堆积，从而产生严重的激子淬灭。

面对以上问题，作者提出了“刚柔并济”的中环分子设计策略，其中七元环高度扭曲的构象有利于抑制分子之间的紧密 π - π 堆积，而环状构象有利于抑制分子内基团的自由旋转，从而提高分子的发光效率，并降低聚集态下的激子淬灭，从而获得了兼具高载流子迁移率和低激子淬灭的二苯并环庚酮类主体材料、高发光效率和低单三线态能隙的七元环二酰亚胺类 TADF 材料、高辐射跃迁速率和高反系间穿越速率的三芳胺类窄光谱硼氮共振类发光材料。

以上包含中环结构的非传统主体材料、TADF 材料和硼氮共振类窄光谱发光材料有效提高了器件效率、降低了器件效率滚降并延长了器件寿命。



Scheme. 1 “Medium-ring” strategy for the development of structurally nontraditional OLED materials

关键词： 中环策略；主体材料；热活化延迟荧光；窄光谱发光材料；有机发光二极管

参考文献

- [1] Z. M. Huang, **Z.Y. Bin,*** J. S. You,* *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59(25)**, 9992.
- [2] W. X. Ma, **Z.Y. Bin,*** J. S. You,* *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61(11)**, e202116681.
- [3] Z. M. Huang, **Z.Y. Bin,*** J. S. You,* *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61(50)**, e202213157.
- [4] B. W. Lei, **Z.Y. Bin,*** J. S. You,* *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **62(12)**, e202218405.

含双金属单元分子链的表面可控组装及电学性质研究

卜冬蕾*

广东工业大学材料与能源学院，广州市番禺区广州大学城外环西路 100 号，510006

*Email: budonglei@gdut.edu.cn

构筑金属/分子/金属结并明确分子结构与其电荷输运性能的关系是分子电子器件实用化的前提。我们建立了一种以 $\text{Rh}_2(\text{RCOO})_4$ ($\text{R} = \text{C}(\text{CH}_3)_3, \text{CH}_3, \text{CF}_3$) 单元为骨架组装分子链的通用方法。利用此方法，我们在电极表面构筑了一系列组成、长度可控的分子链，并对其电荷传输行为和机理进行了探究。实验证明，以 $\text{Rh}_2(\text{CH}_3\text{COO})_4$ 单元为骨架的分子链具有很小的距离衰减因子 ($\beta = 0.003 \text{ \AA}^{-1}$)，可用作分子导线。[1] 在此基础上，电极表面组装了一系列电子给体-桥连配体-电子受体结构的分子链，利用分子链构建了一系列结构不同性能可调的分子整流器，并对其分子链结构与其整流能力的构效关系进行了较为详细的探索。[2, 3] 此外，通过将光敏单元组装到 $\text{Rh}_2(\text{CF}_3\text{COO})_4$ 骨架中，可得到光敏分子链。并利用其在基态和激发态下电子结构的差异构建了一种分子光电探测器。这种分子光电探测器可以实现对入射光的波长和强度的响应。

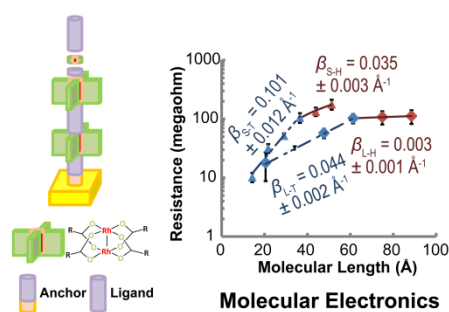


Fig. 1 Schematic diagram of the $\text{Rh}_2(\text{RCOO})_4$ based molecular chain and its charge transfer properties.

关键词： 分子电子学； 电荷传输； 表面组装

参考文献

- [1] Bu, D.; Xiong, Y.; Tan, Y.; Meng, M.; Low, P. J.; Kuang, D. B.; Liu, C. Y. *Chem. Sci.* **2018**, *9*: 3438.
 [2] Bu, D.; Xiong, Y.; Tan, Y. N.; Meng, M.; Liu, C. Y. *Chem. Commun.* **2018**, *54*: 3632.
 [3] Bu, D.; Huang, C.; Sha, P.; Chen, S.; Bu, D.; Huang, S. *Nanoscale* **2021**, *13*: 19200.

主客体掺杂有机室温磷光材料

蔡政旭

北京理工大学，北京市海淀区中关村南大街5号，100081

Email: caizx@bit.edu.cn

有机室温磷光材料因其具有长的发光寿命、大的斯托克斯位移、较低的生物毒性，使其在智能防伪、信息存储以及生物成像领域具有广泛的应用前景。有机室温磷光材料的开发仍然面临巨大挑战，由于存在单线态-三线态间的电子跃迁（系间窜越）过程禁阻、室温下三线态激子不稳定等内在原因，长久以来绝大多数有机分子被认为没有室温磷光特性，从而严重阻碍了其理论研究和应用的发展。

通过分子设计构筑具有高效系间窜越能力的客体分子，并匹配晶态主体分子，将有效的提高三线态激子的产生效率并稳定三线态激子，使原本无室温磷光的客体分子表现出长寿命室温磷光特性。已经成功制备出以三苯胺、苯乙腈、二苯甲酮等不同电子给受体的主体材料，适用于40余种有机客体分子。所制备的材料磷光发射波长覆盖了整个可见光到近红外光谱区，完全可避免生物自荧光的背景干扰，满足不同条件下肿瘤的高信背比成像检测需求。该制备策略具有非常好的普适性，且工艺简单、所需原料成本低廉，产物具有较好的稳定性（水、氧稳定）、无生物毒性以及温度响应性，解决了现阶段磷光材料欠缺的问题。进一步通过分子可控组装，制备了尺寸均一且在水环境下长时间稳定（>10天）的磷光纳米粒子。这种优异的磷光性质可以完全消除成像过程中生物体自荧光的干扰，不仅可用于高效的肿瘤细胞长寿命成像，还可用于小鼠活体的高信背比成像。

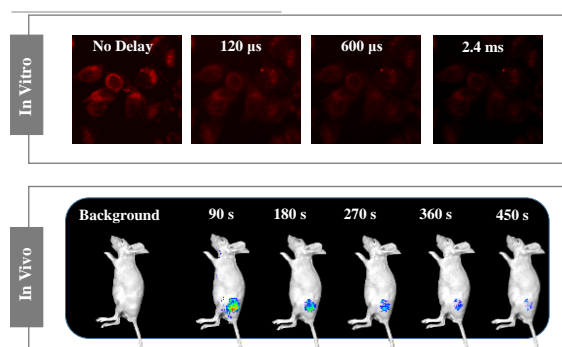


图1 长余辉活体成像

关键词：有机室温磷光；主客体掺杂；智能防伪；生物诊疗

参考文献

- [1] Lei, Y.; Dai, W.; Guan, J.; Guo, S.; Ren, F.; Zhou, Y.; Shi, J.; Tong, B.; Cai, Z.; Zheng, J.; Dong, Y.; Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59(37):16054-16060.
- [2] Yang, J.; Zhang, Y.; Wu, X.; Dai, W.; Chen, D.; Shi, J.; Tong, B.; Peng, Q.; Xie, H.; Cai Z.; Zhang X.; Nat. Commun., 2021, 12, 4883.

多重共振热活化延迟荧光材料的设计、合成及应用研究

曹啸松*, 缪景生, 吕夏蕾, 姜鹏程, 魏亚雄, 李能泉, 杨楚罗¹

¹ 深圳大学, 深圳, 518060

*Email: xcao@szu.edu.cn

多重共振型热活化延迟荧光 (MR-TADF) 材料由于兼具高量子产率和优异的发光色纯度, 展现出良好的应用前景。本报告将着重介绍 MR-TADF 材料在有机发光二极管 (OLED) 领域中的系列研究进展: 1) 采用外围“挡板”策略抑制聚集诱导淬灭, 取得了窄发射 OLED 效率突破^[1]; 2) 利用共轭拓展策略缩短激发态寿命, 实现了高性能深蓝光 OLED^[2]; 3) 通过合理引入中心手性单元, 实现了分子刚性和圆偏振发光效应的有机结合, 获得了高效窄发射圆偏振电致发光^[3]。与此同时, 我们首次将 MR-TADF 材料作为光敏剂应用于三重态-三重态湮灭上转换 (TTA-UC), 实现了高效、低阈值强度的绿光-紫外光上转换^[4,5]。

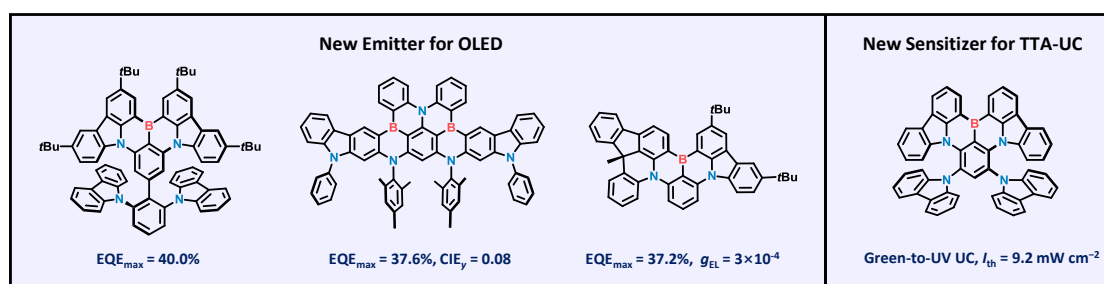


Fig. 1 Applications of MR-TADF compounds in OLED and TTA-UC

关键词: 有机发光二极管; 三重态-三重态湮灭上转换; 热活化延迟荧光; 多重共振

参考文献

- [1] P. Jiang, J. Miao, X. Cao*, H. Xia, K. Pan, T. Hua, X. Lv, Z. Huang, Y. Zou, C. Yang*, *Adv. Mater.* **2021**, 34, 2106954.
- [2] X. Lv, J. Miao, M. Liu, Q. Peng, C. Zhong, Y. Hu, X. Cao*, H. Wu, Y. Yang, C. Zhou, J. Ma, Y. Zou, C. Yang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202201588.
- [3] Y. Yang, N. Li, J. Miao, X. Cao*, A. Ying, K. Pan, X. Lv, F. Ni, Z. Huang, S. Gong, C. Yang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202202227.
- [4] Y. Wei, K. Pan, X. Cao*, Y. Li, X. Zhou, C. Yang*, *CCS Chem.* **2022**, 4, 3852-3863.
- [5] X. Cao*, K. Pan, J. Miao, X. Lv, Z. Huang, F. Ni, X. Yin, Y. Wei,*, C. Yang*, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 22976-22984

Disorder-driven high doping efficiency in N-type fullerene-based organic thermoelectrics with polar side chains

Yan Zeng (曾艳)¹, Guangchao Han¹, Yuanping Yi^{1,*}

¹ Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, CAS Key Laboratory of Organic Solids, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190

*Email: ypyi@iccas.ac.cn

Due to the low molecular doping efficiency, N-type organic materials with high thermoelectric performance still remain challenging. Recently, a series of N-type organic semiconductors with high doping efficiency and high thermoelectric performance have been developed through polar side chain. However, the underlying mechanism of how polar side chain modification significantly improves the doping efficiency of N-type organic semiconductors is not yet clear. Here, we combination of molecular dynamics simulations and polarizable force field calculations to investigate how polar side chains affects N-DMBI doping process in fullerene derivatives. We find that N-DMBI can form efficient charge transfer complexes. Meanwhile, introducing polar side chain increases the disorder of polarization energy, which reduces the charge-separation barrier. Our results reveal the mechanism of how polar side chains improve the doping efficiency and pave the way for enhancing the thermoelectric performance of N-type organic materials.

Keywords: organic thermoelectrics, fullerene derivatives, polar side chains, energetic disorder

Reference

- [1] Liu, J.; Qiu, L.; Portale, G.; Koopmans, M.; ten Brink, G.; Hummelen, J. C.; Koster, L. J. A., *Adv. Mater.* **2017**, **29** (36): 1701641.
- [2] Liu, J.; Qiu, L.; Portale, G.; Torabi, S.; Stuart, M. C. A.; Qiu, X.; Koopmans, M.; Chiechi, R. C.; Hummelen, J. C.; Anton Koster, L. J., *Nano Energy* **2018**, **52**: 183-191.
- [3] Liu, J.; van der Zee, B.; Alessandri, R.; Sami, S.; Dong, J.; Nugraha, M. I.; Barker, A. J.; Rousseva, S.; Qiu, L.; Qiu, X.; Klasen, N.; Chiechi, R. C.; Baran, D.; Caironi, M.; Anthopoulos, T. D.; Portale, G.; Havenith, R. W. A.; Marrink, S. J.; Hummelen, J. C.; Koster, L. J. A., *Nat. Commun.* **2020**, **11** (1): 5694.

拓扑共轭材料及其共轭自由基性质

曾泽兵*

湖南大学化学化工学院，化学生物传感与计量学国家重点实验室，410082

*Email: zbzeng@hnu.edu.cn

拓扑共轭体系具备独特的光电磁等性能，且随着分子尺寸增大，呈现出系列拓扑结构及其自由基性质，成为材料科学、化学、有机电子学和自旋电子学等领域的研究前沿与难点。我们着力于发展湿法合成手段和电子结构调控策略，构筑了原子级精准的大尺寸拓扑共轭体系，探讨分子材料的光电物理性质，以及共轭自由基产生的 π 磁化，介绍的工作内容包括：1) 非交替线性共轭体系和曲面碗烯体系，这些纳米分子的离子化过程中，反芳香性稀释为共轭自由基的形成提供驱动力^[1-2]；2) 稳定的潜手性拓扑共轭材料及其手性自由基^[3]；3) 新型拓扑平庸-非平庸的交替共轭体系及其分子异质界面产生的奇异电子自旋极化与反铁磁自由基性质^[4]。

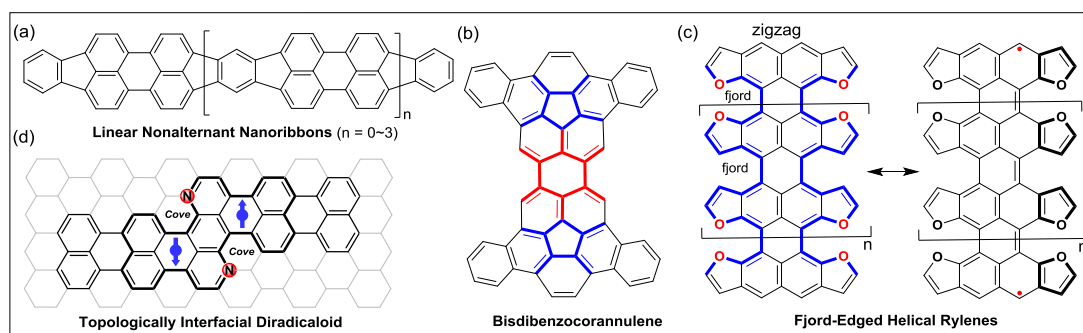


Fig. 1 Representative topologically conjugated π -systems

关键词：共轭体系；拓扑结构；自由基；光电磁功能；电子结构

参考文献

- [1] Y, Wang.; Zeng, Z.*; et. al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202200855.
 [2] Li, B.; Z. Zeng*, et. al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 19790-19796.
 [3] Luo, T.; Z. Zeng*, et. al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202214653.
 [3] Li, Z.H.; Z. Zeng*, et. al. *Chem* **2023**, *9*, DOI:10.1016/j.chempr.2023.01.019

不对称受体分子的设计及其高效光伏器件

李水兴, 占玲玲, 何程亮, 陈红征*

浙江大学高分子系, 杭州, 310027

*Email: hzchen@zju.edu.cn

有机光伏材料的开发是推动有机太阳能电池发展的关键所在, 特别是有机电子受体材料, 由于其丰富的结构可调性, 可以有效地针对有机太阳能电池中的关键性问题, 譬如能量损耗和电荷复合, 进行设计优化, 从而促使有机太阳能电池实现效率突破。针对能损是制约开路电压提高的关键, 我们采用不对称封端策略, 设计制备了系列A₁-D-A₂类型的不对称电子受体, 增强其发光量子效率, 降低非辐射复合损失, 同时实现了低能损和低驱动力下的有效电荷分离。进一步通过三元策略, 对器件光伏性能中的短路电流、开路电压和填充因子三个参数实现了协同优化, 并最终实现三元有机太阳能电池光伏性能的提升, 制备了光电转化效率大于19%的三元有机太阳能电池器件。

关键词: 电子受体; 有机光伏器件; 不对称结构

参考文献

- [1] Li, S.; Zhan, L.; Jin, Y.; Zhou, G.; Lau, T.-K.; Qin, R.; Shi, M.; Li, C.-Z.; Zhu, H.; Lu, X.; Zhang, F.; Chen, H., *Adv. Mater.* **2020**, **32**:2001160.
- [2] Zhan, L.; Li, S.; Xia, X.; Li, Y.; Lu, X.; Zuo, L.; Shi, M.; Chen, H., Layer-by-Layer Processed Ternary Organic Photovoltaics with Efficiency over 18%, *Adv. Mater.* **2021**, **33**: 200723
- [3] He, C.; Bi, Z.; Chen, Z.; Guo, J.; Xia, X.; Lu, X.; Min, J.; Zhu, H.; Ma, W.; Zuo, L.; Chen, H., *Adv. Funct. Mater.* **2022**, 2112511
- [4] Zhan, L.; Li, S.; Lau, Li, Y.; Sun, R.; Min, J.; Bi, Z.; Ma, W.; Chen, Z.; Zhou, G.; Zhu, H.; Shi, M.; Zuo, L.; Chen, H., *Joule* **2022**, **6**: 662

芳香二酮衍生的高迁移率有机/聚合物半导体

陈华杰*, 陶欣, 杨鑫, 赵伶俐, 易星宇

湘潭大学化学学院, 环境友好化学与应用教育部重点实验室, 湘潭 411105

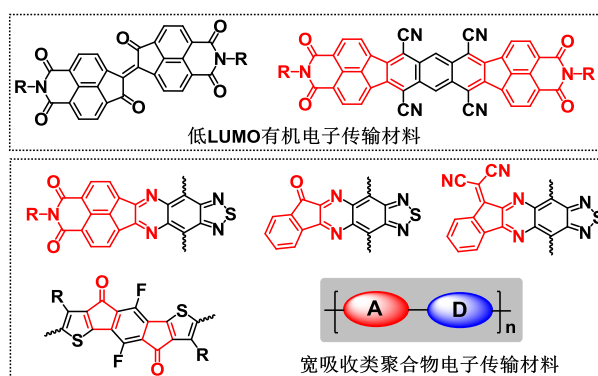
*E-mail: chenhjoe@xtu.edu.cn

本课题组致力于开发芳香二酮衍生类有机/聚合物半导体, 该分子体系结合了经典梯形多元稠环、杂环和芳香酰亚胺/内酰胺的优势, 具有骨架平面性好、组装能力强、电子亲和力强以及结构易于修饰等优点^[1-5], 对其探索研究可丰富有机/聚合物半导体的种类, 发展全新的材料结构↔聚集态结构↔载流子传输性能关系的研究平台。主要成果介绍如下:

1) 发展全新的高迁移率聚合物半导体材料分子体系, 发现芳香二酮类聚合物半导体的空穴和电子迁移率分别可达10和1.0 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 以上, 可媲美经典的酰亚胺/内酰胺(如: DPP, NDI和IDG)类聚合物半导体^[1];

2) 发展绿色、高效多重Knoevenagel缩合方法, 开发了n-型双缩茚醌酰亚胺和四氰基取代线性11元稠环二酰亚胺有机半导体, 其单晶场效应晶体管器件的电子迁移率可达10.0 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 以上^[2];

3) 采用酮胺缩合反应, 开发系列氮杂醌式强受体及其超低带隙聚合物半导体, 发现其吸收光谱可拓宽至2000 nm以上, 其薄膜场效应晶体管器件展现出优异的近红外光响应性能^[3]。



关键词: 芳香二酮; 有机半导体; 聚合物半导体; 场效应晶体管; 高迁移率

参考文献

- [1] Tao, X.; Li, W.; Wu, Q.; Wei, H.; Yan, Y.; Zhao, L.; Hu, Y.; Zhao, Y.*; Chen, H.*; Liu, Y. *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, *33*: 2210846.
- [2] Yang, X.; Yan, Y.; Zeng, W.; Song, Y.; Li, W.; Zhao, L.; Zhao, Y.*; Chen, H.*; Liu, Y. *Chem. Commun.*, **2021**, *57*: 7822.
- [3] (a) Yang, J.; Zhao, L.; Yin, Z.; Wang, J.; Zhao, Y.*; Chen, H.*; Liu, Y. *Macromolecules*, **2021**, *54*: 3120; (b) Chen, H.*; Cai, G.; Guo, A.; Zhao, Z.; Kuang, J.; Zheng, L.; Zhao, L.; Chen, J.; Guo, Y.*; Liu, Y.*. *Macromolecules*, **2019**, *52*: 6149.
- [4] Yi, X.; Gao, J.; Qin, H.; Zheng, L.; Zeng, W.*; Chen, H*. *Org. Lett.*, **2023**, *25*: 972.
- [5] Chen, Y.; Zhao, L.; Chen, P.; Li, Y.; Guo, J.; Liu, Y.; Qiu, X.; Chen, K.; Chen, H.*; Lu, X.; Jiang, L.; Liao, L.; Nguyen, T.*; Hu, Y.* *Matter*, **2022**, *5*: 2882.

面向神经形态显示的有机晶体管

陈惠鹏

福州大学，福建省福州市福州大学城乌龙江北大道 2 号，350026

*Email: hpchen@fzu.edu.cn

目前显示正朝着立体真实、多场景、人机交互、实时感知的显示智能化方向发展。这需要及时感知大量的外界信息，快速处理海量数据，并实时完成显示的交互。因此，未来显示技术的硬件设备将面临功耗及效率方面的巨大挑战。生物大脑因具备高效、并行处理、低功耗的特点，在处理大数据和执行人工智能算法时有着传统冯诺依曼架构计算设备所不具备的独特优势，因此将模仿人脑架构的神经形态技术与显示技术结合的神经形态显示技术将是解决未来显示功耗效率挑战的有效策略之一。本次报告将重点介绍我们在神经形态显示的最新研究工作。¹⁻³

关键词：神经形态显示；有机晶体管；显示

参考文献

- [1] Li, E.; Gao, C.; Yu, R.; Wang, X.; He, L.; Hu, Y.; Chen, H.; Chen, H.; Guo, T. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 2898.
- [2] Liu, Y.; Liu, D.; Gao, C.; Zhang, X.; Yu, R.; Wang, X.; Li, E.; Hu, Y.; Guo, T.; Chen, H. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 7917.
- [3] Yu, R.; He, L.; Gao, C.; Zhang, Z.; Li, E.; Guo, T.; Li, W.; Chen, H. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 7019.

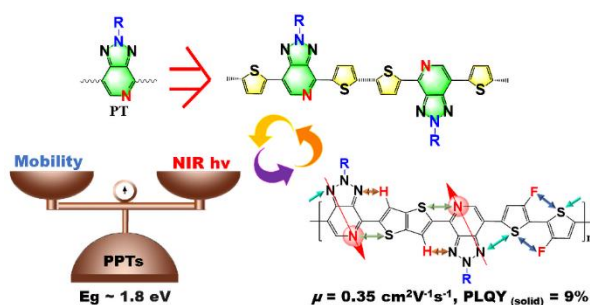
吡啶并三氮唑类聚合物半导体实现高迁移率与近红外发光集成

陈金佺¹, 郭云龙^{1,*}, 刘云圻^{1,*}¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 邮编 100190

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn; liuyunqi@iccas.ac.cn

聚合物半导体具有柔性、溶液可加工性、潜在印刷性和可扩展性等特性以及优异的光电性能。在集成电路、光通信、有源矩阵显示器等领域有着巨大的应用潜力。根据分子设计原理, 同时实现强发光与高效的载流子传输这两种特性被认为是自相矛盾的, 因此高迁移率发光聚合物半导体的发展一直是有机光电子领域的一个巨大挑战。特别是, 由于共轭主链非平面或光学带隙过宽使得高迁移率近红外 (NIR, 700-1000 nm) 发光聚合物半导体的实现更为困难。因此, 开发新的功能构筑模块及有效的设计策略是实现聚合物光电子领域新突破的关键。

我们课题组首次报道了一种新型的全刚性共平面的噻吩-吡啶并三氮唑-噻吩 (T-PT-T) 类结构, 并合成了一系列吡啶并三氮唑类区域规整型聚合物半导体 (PPT-1~PPT-3, PPTs)。具有区域选择性的吡啶并三氮唑受体与噻吩基给体相结合诱导分子内非共价相互作用促进了载流子传输, 全刚性共平面的骨架结构减少了分子振动引起的激子猝灭。有机场效应晶体管和有机发光二极管的器件表征结果证明, 由于平衡的分子间相互作用和非辐射能量转移, 具有合适能隙 ($E_g \sim 1.8$ eV) 的PPTs同时表现出高迁移率和NIR光致发光以及电致发光特性。特别是, 合成的聚合物之一的PPT-2的迁移率达到 $0.35 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 薄膜态的光致发光量子产率达到9%, 是目前报道的NIR发光聚合物半导体中的最高值之一。该研究不仅对结构和光电性能关系的理解具有重要的补充作用, 而且为开发高迁移率近红外发光聚合物半导体提供了多功能设计平台和更多的可能性。



关键词: 吡啶并三氮唑; 高迁移率; 近红外发光; 有机场效应晶体管; 有机发光二极管

参考文献

- [1] Jinyang Chen, Junhua Kuang, Yanwei Liu, Jie Yang, Mingliang Zhu, Xiaofang Wei, Mingchao Shao, Zhiyuan Zhao, Yunlong Guo,* and Yunqi Liu. *Adv. Optical. Mater.* **2022**, *10*: 2201243.
- [1] Jinyang Chen, Jie Yang, Yunlong Guo,* and Yunqi Liu. *Adv. Mater.* **2021**, *34*: 2104325.

二维共轭高分子材料与器件

陈龙^{1,2*}

¹ 吉林大学化学学院, 长春, 130012

² 天津大学化学系, 天津, 300072

*Email: longchen@jlu.edu.cn

一维线性共轭高分子, 特别是含给-受体结构的线性共轭高分子在有机光电领域获得了长足的发展和运用。已有大量报道证明在一维共轭聚合物骨架中引入共轭侧基, 即将传统的“一维共轭”拓展为“二维共轭”结构, 可以有效的提高线性高分子在有机光伏器件中的性能。^[1]

基于此, 我们致力于将“二维共轭”的分子结构设计思想引入到二维框架材料中, 高效制备二维共轭高分子材料, 以进一步提高电子离域程度及相关器件性能。课题组近年来聚焦新型二维高分子的高效制备与功能应用, 提出了“二合一”高效构筑二维高分子的新策略, 揭示了双官能团单分子自聚制备二维高分子的优势和机制;^[2] 通过分子平面化、分子间氢键、电子给-受体等超分子相互作用发展了稳定晶态二维高分子的新方法;^[3] 开发了逐层组装制备高质量二维高分子薄膜的通用方法, 拓展了二维高分子在有机自旋电子学及能源材料中的新应用;^[4] 为二维高分子的合成方法学与器件化研究提供了新思路和方法。^[5-6]

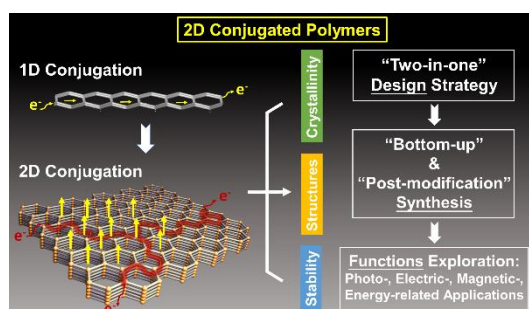


Fig. 1 Schematic illustration of the features, functions and challenges towards 2D conjugated polymers.

关键词: 二维共轭; 光电磁功能高分子; 聚集态控制

参考文献

- [1] Cui, C.; Wong, W-Y.*; Li, Y.* *Energy Environ. Sci.*, **2014**, 7, 2276.
- [2] Li, Y.; Chen, Q.; Xu, T.; Liu, J.; Yu, X.; Ma, S.; Qin, T.; Chen, L.* *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 13822.
- [3] Xing, G.; Zheng, W.; Gao, L.; Zhang, T.; Wu, X.; Fu, S.; Song, X.; Zhao, Z.; Osella, S.; Wang, H.; Cai, J.; Mateo-Alonso, A.; Chen, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144, 8214; Qi, M.; Zhou, Y.; Lv, Y.; Chen, W.; Su, X.; Zhang, T.; Xing, G.; Xu, G.; Terasaki, O.; Chen, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 2739.
- [4] Song, X.; Wang, X.; Li, Y.; Zheng, C.; Zhang, B.; Di, C.; Li Feng, Jin, C.*; Mi, W.; Chen, L.*; Hu, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 1118.
- [5] Li, Y.; Chen, W.; Xing, G.; Jiang, D.; Chen, L.* *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49, 2852.
- [6] Zhang, T.; Zhang, G.; Chen, L. *Acc. Chem. Res.* **2022**, 55, 795.

片状聚乙烯单晶的本征介电性能

陈敏¹, 李寒莹^{1,*},

¹ 高分子合成与功能构造教育部重点实验室, 浙江大学高分子新物质创制国际研究中心,
山西浙大新材料与化工研究院, 浙江大学高分子科学与工程学系, 杭州, 310027

*Email: hanying_li@zju.edu.cn

绝缘聚合物在绝缘材料中具有重要地位, 其中大部分是半结晶性的聚合物。高分子片晶, 既是常规条件下可得到的聚合物的最有序结构, 也是半结晶聚合物材料的基本组成部分之一。研究其介电性能, 对于从微观层面建立聚集态结构-介电性能的关系、理解材料介电性能来源具有重要意义。但是, 由于缺乏合适的材料和研究策略, 该方面的实验研究尚未得到有效开展。在本工作中, 我们选择了典型的绝缘聚合物材料——聚乙烯做为研究对象。首先, 采用自成核方法得到了百微米大小的聚乙烯片状单晶。通过平面电极工艺构筑了垂直三明治结构的电容器件, 首次实现了对聚乙烯单晶的击穿强度(6.95 MV/cm)和介电常数(2.14)的报导。本工作提出的见解不仅加深了聚乙烯聚集态结构对其介电性能影响的理解, 也为其它有前景的绝缘聚合物片晶介电性能的研究提供的基本策略。此外, 聚乙烯片晶表现出的优异介电性能, 展示了其在高能量密度电容器、有机场效应晶体管绝缘层等领域的应用潜力。

关键词: 聚乙烯; 单晶; 介电性能

钙钛矿材料与器件的异质性

陈棋^{1,*}¹北京理工大学, 材料学院, 中关村南大街5号, 北京100081

*Email: qic@bit.edu.cn

近年来, 基于杂化卤素钙钛矿材料(hybrid halide perovskites)的太阳能电池发展迅猛, 被业界广泛关注。然而钙钛矿材料多样的组分造成了晶体在不同尺度的异质性(不均一), 在元素成分、相态、微结构、表界面特性等多个维度发生。由此带来材料局域光电学性能的差异, 在使役过程中不断加剧, 严重影响器件的效率和稳定性。我们系统研究了材料与器件异质性的产生发展机制, 揭示其对器件性能的影响规律, 制备大面积高效稳定太阳能电池, 开展以下三方面工作: 1) 调控材料体相异质性: 开发“液相介质退火”薄膜制备新方法, 精准调控组分基元扩散动力学, 生长大面积高质量薄膜; 2) 利用材料表界面异质性: 设计新型异质结界面, 引入多重化学键作用调控功能组分, 构筑“双背场”器件结构, 制备高效稳定器件; 3) 阐明异质性对材料性能的影响规律: 发展深度分辨的材料表征新方法, 发现表面异质性集中的现象, 并揭示材料结构与组分调控载流子动力学与器件老化的关键机制。

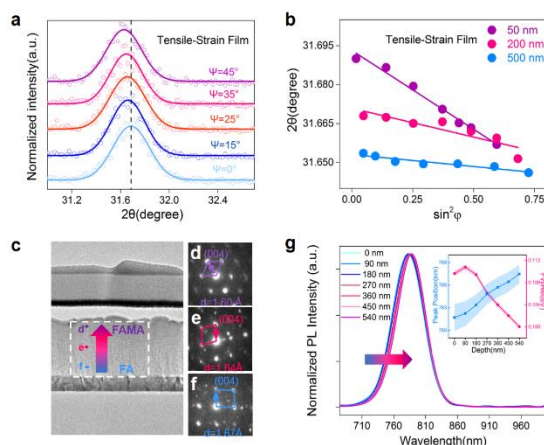


Fig. 1 Heterogeneity in perovskite thin films

关键词: 均一性; 稳定性; 载流子动力学; 光伏; 晶体生长 (五号宋体, 关键词个数不超过5个)

参考文献

- [1] H. Zai, Q. Chen*, et al., *Joule* **2021**, **5**: 2148.
- [2] N. Li, X. Niu, Q. Chen*, H. Zhou*, et al., *Science* **2021**, **373**: 561.
- [3] J. Dou, Q. Chen*, et al., *Adv. Mater.* **2021**, **33**: 2102947.
- [4] L. Liu, Q. Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**: 5979.
- [5] C. Zhu, Q. Chen*, et al., *Nature Commun.* **2019**, **10**: 815.
- [6] H. Wang, Q. Chen*, et al., *Adv. Mater.* **2019**, **31**: 1904408.

锯齿型边缘稠环芳烃的合成与受激辐射特性

陈强*

苏州大学 功能纳米与软物质研究院, 江苏省苏州工业园区仁爱路 199 号, 215123

*Email: chenqyz@hotmail.com

稠环芳烃是有机电子学和有机光电材料领域的经典体系, 使用化学合成方法调节分子形状、尺寸和边缘结构能够精确调控其电子结构、物理性质和材料性能。强荧光性质的稠环芳烃因在有机发光器件和生物成像等领域的巨大应用潜力而吸引广泛关注。然而, 目前制备兼具优异化学稳定性和强荧光性质的稠环芳烃仍然面临诸多挑战。在此, 我们设计并合成了一种锯齿型边缘稠环芳烃-二苯并[hi,st]卵苯 (DBOV), 该分子具有长波长吸收与荧光发射、高荧光量子效率和受激辐射等优异光学性质, 并在固态下表现出放大自发辐射 (ASE)。不同于以往报道的锯齿型边缘稠环芳烃, 该分子还展现出优异的化学稳定性, 有利于其在光电材料中的实际应用。此外, 我们还开发了一种基于氯化碘促进二芳基丁二炔苯并环化-光照脱碘化氢稠环化的新型制备方法, 实现了该类分子的高效合成。进而使用区域选择性溴化和金属催化偶联反应作为关键步骤, 精确调控其光学性能并将其用于构筑近红外发光分布式反馈激光器。

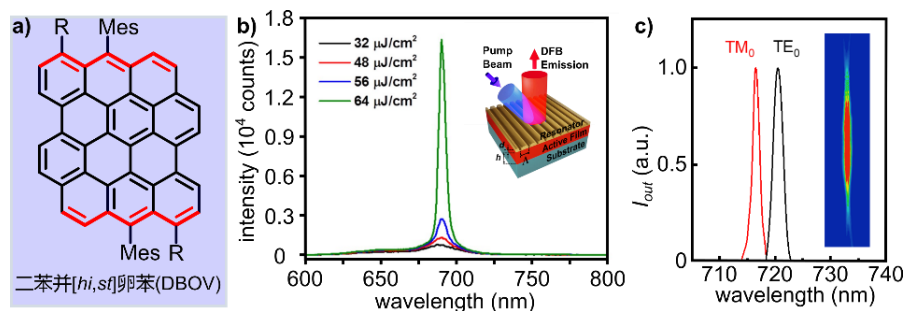


Fig. 1 a) Chemical structure of DBOV, b) photoluminescence spectra of DBOV taken at laser power fluences below and above the ASE threshold and c) emission spectra of a distributed feedback laser using DBOV derivative as active layer.

关键词: 稠环芳烃; 锯齿型边缘; 强荧光; 受激发射; DFB激光器

参考文献

- [1] Paternò G. M., Chen Q., Wang X. Y., Liu J., Motti S. G., Petrozza A., Feng X., Lanzani G., Müllen K., Narita A., Scotognella F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*(24): 6753.
- [2] Chen Q., Thoms S., Stöttinger S., Schollmeyer D., Müllen K., Narita A., Basché T. *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*(41): 16439.
- [3] Chen Q., Schollmeyer D., Müllen K., Narita A. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*(41): 19994.
- [4] Paternò G. M., Chen Q., Mármol R. M., Guizzardi M., Bonal V., Kabe R., Barker A. J., Boj P. G., Chatterjee S., Ie Y., Villalvilla J. M., Quintana J. A., Scotognella F., Müllen K., Díaz-García M. A., Narita A., Lanzani G. *Mater. Horiz.* **2022**, *9*(1): 393.

有机长余辉材料发光机理与应用

陈润锋^{1,*}

¹ 南京邮电大学信息材料与纳米技术研究院, 南京亚东新城区文苑路9号, 210023

*Email: iamrfchen@njupt.edu.cn

有机室温磷光材料具有较长三线态寿命、长距离激子迁移、无金属、易修饰、可溶液加工等优点, 在显示、照明、光催化、防伪与加密、分子传感和生物成像等领域具有广阔的应用前景, 已成为当前的研究热点。我们系统研究了有机材料激发态寿命调控的基本原理, 探索有机长余辉固态发光与磷光能量转移机制, 发现并利用磷光Förster共振能量转移现象, 阐明了长寿命三线态敏化有机荧光分子发光的机制, 获得了从蓝色到红色甚至是白光的全彩聚合物长余辉, 余辉寿命最高达4.2 s、发光效率为36%, 此高效转化短寿命有机荧光可为长余辉的方法为开发有机长余辉材料提供新思路。进一步, 提出了手性簇晶体的分子设计策略, 将手性单元植入非共轭磷光杂原子簇聚集体中, 利用手性簇晶体中大量的面内和层间分子间相互作用抑制三线态激子的非辐射跃迁、形成强的空间共轭, 构建了尺寸依赖的簇触发圆偏振有机长余辉发光中心, 实现了多彩单组分圆偏振有机长余辉, 为构筑具有激发波长依赖、颜色可调圆偏振有机超长室温磷光材料的提供了新途径。

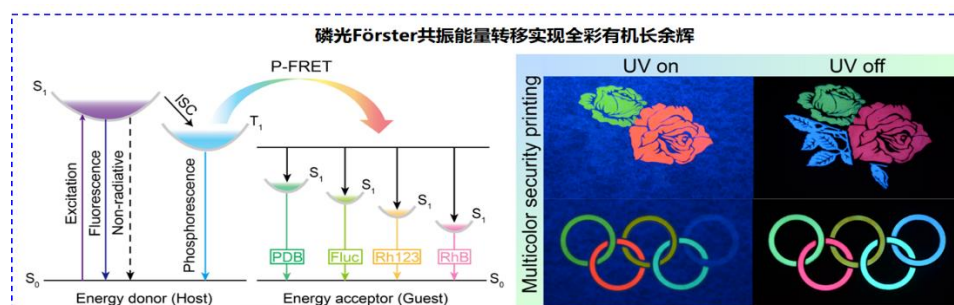


Fig. 1 Phosphorescence Förster resonance energy transfer and full-color organic afterglow

关键词: 有机室温磷光; 有机超长室温磷光; 有机余辉; 发光机理; 激发态调控

参考文献

- [1] An, Z.; Zheng, C.; Tao, Y.; Chen, R.*; Shi, H.; Chen, T.; Wang, Z.; Li, H.; Deng, R.; Liu, X.*; Huang, W.*; *Nat. Mater.* **2015**, *14*: 685.
- [2] Shen Xu, Wu Wang, Hui Li, Jingyu Zhang, Runfeng Chen*, Shuang Wang, Chao Zheng, Guichuan Xing*, Chunyuan Song, Wei Huang*; *Nat. Commun.* **2020**, *11*:4802.
- [3] Hao Peng, Gaozhan Xie, Yang Cao, Longyan Zhang, Xi Yan, Xiao Zhang, Shihao Miao, Ye Tao*, Huanhuan Li, Chao Zheng, Wei Huang*, Runfeng Chen*; *Sci. Adv.* **2022**, DOI: 10.1126/sciadv.abk2925.
- [4] Hui Li, Jie Gu, Zijie Wang, Juan Wang, Fei He, Ping Li, Ye Tao*, Huanhuan Li, Gaozhan Xie, Wei Huang*, Chao Zheng, Runfeng Chen*; *Nat. Commun.* **2022**, *13*(1): 429.

拓展卟啉化合物的表面精准合成及电子性质研究

陈婷

中国科学院化学研究所, 北京, 100190

Email: chenting@iccas.ac.cn

表面合成是精准构建有机功能分子与材料的有效途径之一。一方面, 衬底为偶联反应提供了二维限域环境, 同时还可作为催化剂促进许多偶联反应的进行; 另一方面, 表面辅助反应可以在超高真空条件下进行, 不受溶剂体系, 产物的溶解度等因素限制, 可以制备一些在溶液中不稳定或难以合成的产物; 此外, 利用STM及*qplus*-AFM等表面分析技术, 可以从原子尺度直接对反应过程中分子的结构及电子性质进行表征和测量。我们利用基于STM的成像及谱学技术, 研究了金属表面辅助的卟啉分子内及分子间C-C/N偶联反应, 制备了 γ -*ortho*融合卟啉及N杂卟啉等拓展卟啉化合物, 并揭示了它们的电子结构和性质。该工作实现了具有大 π 体系的卟啉分子结构的精准合成, 并从分子水平上揭示了卟啉类化合物的化学反应性, 为合成具有扩展大 π 体系和明确电子结构的卟啉类化合物提供了基础。

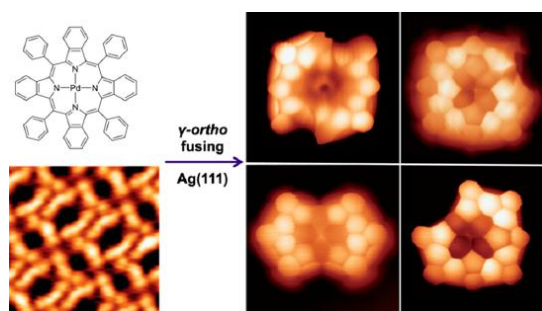


Figure 1. On-surface synthesis of γ -ortho fused Pd-TPTBP.

关键词: 表面合成; 扫描隧道显微镜; 卟啉; 电子结构

参考文献

- [1] Yang, X.Q.; Duan, J.J.; Su, J.; Peng, X.; Yi, Z.Y.; Li, R.N.; Lu, J.; Wang, S.F.; Chen, T.; Wang, D. *ACS Nano*, **2022**, *16*: 13092.
- [2] Yi, Z.Y.; Yang, X. Q.; Duan, J.J.; Zhou, X.; Chen, T.; Wang, D.; Wan, L.J. *Nat. Commun.*, **2022**, *13*: 5850.

柔性聚合物太阳能电池集成设计与印刷工艺

陈义旺*

南昌大学高分子及能源化学研究院，南昌市学府大道 999 号，南昌 330031

江西师范大学高等研究院，南昌市紫阳大道 99 号，南昌 330022

E-mail: ywchen@ncu.edu.cn

有机太阳能电池活性层异质结界面稳定性和相纯度以及缓冲层界面能级匹配和柔性透明电极等问题是发展柔性有机太阳能电池的关键问题。基于高分子纳米复合材料界面科学问题，围绕器件结构优化与印刷制备应用，实现印刷制造柔性太阳能电池。解决从旋涂到大面积“卷对卷”印刷的转化，解决柔性透明电极湿法印刷加工，解决柔性有机太阳能电池印刷活性层形貌及界面调控问题，解决柔性太阳能电池稳定性及耐弯折问题。

针对有机太阳能电池活性层在实验室旋涂工艺和大面积制备印刷工艺中形貌演变的差异，提出了柔性有机太阳能电池活性层形貌演化的转换因子和大面积制备工艺。提出了解决旋涂工艺到印刷工艺中能量损失补偿问题，同时提出利用层层印刷实现三元组分器件制备，通过“三元问题二元化”解决了复杂三元组分形貌难以控制问题，回答添加剂在层层印刷过程中形貌演变角色作用。

关键词：聚合物太阳能电池；形貌演变；界面工程；透明电极；印刷工艺

离子液体钙钛矿光伏电池

陈永华*

南京工业大学柔性电子（未来技术）学院 南京 210009

Email: iamychen@njtech.edu.cn

钙钛矿光伏电池是未来能源重要的组成部分，其区别传统光伏电池最大的特色之一即可低温溶液加工性，溶剂的重要性不言而喻，其要求绿色、无污染、空气中制备以及易于操作等。我们开发了一些列新颖的离子液体溶剂（如醋酸甲胺 MAAC、醋酸丁胺 BAAC、甲酸甲胺 MAFa 等），空气中制备钙钛矿薄膜并获得了高效稳定的钙钛矿太阳能电池的方法，打破了传统使用的高毒性、强配位的质子型 DMF、DMSO、NMP 等溶剂的限制。^[1-10] 基于离子液体溶剂体系，我们获得了高效的层状钙钛矿太阳能电池，器件表现出极好的稳定性；构筑了一系列不同量子阱宽度的纯相二维钙钛矿薄膜及其高效的钙钛矿太阳能电池应用，为探索二维层状钙钛矿本征光物理性质提供了实验基础；实现了室温下、高湿度空气中甲脒基钙钛矿的制备，获得了高效且稳定的钙钛矿光伏电池，达到了国际该领域的先进水平。开发了丝网印刷钙钛矿薄膜新工艺，实现了空气中高速规模化光伏电池的制备。

关键词：钙钛矿太阳能电池，离子液体，稳定性

参考文献

- [1] C. Chen, J. Chen, H. Han, L. Chao, **Y. Chen,*** W. Huang,* et al *Nature* 2022, DOI: 10.1038/s41586-022-05346-0.
- [2] W. Hui, L. Chao, H. Lu, **Y. Chen,*** W. Huang,* et al *Science*, 371 (2021) 1359-1364.
- [3] C. Liang, H. Gu, Y. Xia, **Y. Chen,*** G. Xing,* W. Huang,* et al *Nat. Energy* 6 (2021) 38-45.
- [4] H. Ren, S. Yu, L. Chao, L. Zhang,* **Y. Chen,*** W. Huang,* et al *Nat. Photonics* 14 (2020) 154-163.
- [5] L. Chao, Y. Xia, X. Duan, **Y. Chen,*** et al *Joule* 6 (2022) 2203-2217.
- [6] L. Chao, Y. Xia, B. Li, G. Xing, **Y. Chen,*** Wei Huang,* *Chem* 5 (2019) 995-1006.
- [7] X. Wang, X. Ran, X. Liu, H. Gu, Y. Xia*, **Y. Chen,*** and W. Huang,* et al *Angew. Chem.* 59 (2020) 13354-13361.
- [8] L. Chao, T. Niu, Y. Xia, **Y. Chen,*** W. Huang,* *Acc. Mater. Res.* 2 (2021) 1059-1070.
- [9] L. Chao, T. Niu, W. Gao, C. Ran,* L. Song, **Y. Chen,*** W. Huang,* *Adv. Mater.* 33 (2021) 2005410.
- [10] D. Li, L. Chao, C. Chen, Y. Xia,* Y. Chen,* W. Huang,* et al *Nano Lett.* 59 (2020) 5799-5806.

协同掺杂效应在非富勒烯太阳能电池中的应用

陈智慧¹, 刘瑶^{2,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 10010

²北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路15号, 100020

*Email: liuyao@mails.buct.edu.cn

模糊而复杂的界面掺杂作用使新型阴极界面材料的分子设计面临挑战, 阻碍了非富勒烯有机太阳能电池 (OSCs) 光电性能的发展。我们首次深入研究了阴极界面材料的自掺杂作用以及其对活性层中受体产生的掺杂作用, 提出了同步掺杂效应。研究表明, 具有吸电子共轭中心的C₆₀-N同时具有良好的非富勒烯受体掺杂和自掺杂作用, 即同步掺杂效应 (如图Fig. 1所示), 有效地促进了阴极界面处电荷的传输和收集, 使基于PM6:L8-BO的二元OSCs获得了> 18%的光电转换效率。这一发现为有机电子学中高性能阴极界面材料的分子设计提供了可靠的理论指导。

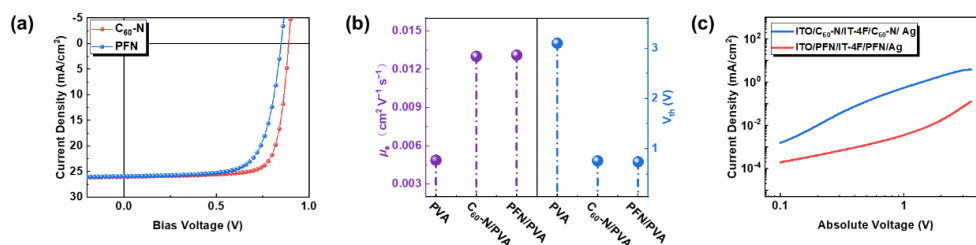


Fig. 1 (a) The optimal J-V curves based on C₆₀-N and PFN modified PM6:L8-BO OSCs. (b) The electron mobilities and threshold voltage extracted from organic field-effect transistors with PVA, C₆₀-N/PVA, and PFN/PVA as insulators. (c) Space charge-limited current measurements for C₆₀-N and PFN based IT-4F electron-only devices.

我们进一步开发了具有多位点修饰作用的新型阴极界面修饰材料, PDI-EA和NDI-EA (如图Fig. 2所示), 通过同时引入多个位点的羟基和胺基作为掺杂功能单元, 有效地增强了掺杂作用, 并且明显改善阴极/活性层界面处的能级排列, 最终基于PM6:L8-BO的二元OSCs获得了18.5%的光电转换效率, 这是PM6:L8-BO二元OSCs中报道的最高值之一。

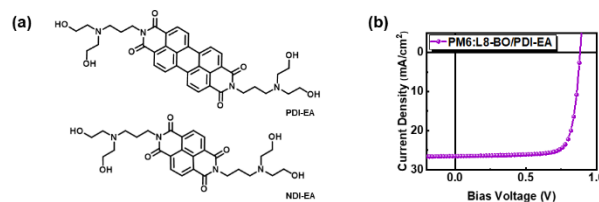


Fig. 2 (a) Schematic molecular structures of PDI-EA and NDI-EA. (b) The optimal J-V curves based on PDI-EA modified PM6:L8-BO OSCs.

关键词: 阴极界面材料; 非富勒烯太阳能电池; 协同掺杂效应

参考文献

- [1] Chen, Z.; Huang, Y.; Gao, J.; Zhang, L.; Ma, Z.; Liu, M., Emrick, T., Liu, Y. *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*: 4052.
- [2] Chen, Z.; Li, Q.; Jiang, Y.; Lee, H.; Ma, Z.; Russel, T., Liu, Y. *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*: 16163.

碳硼烷桥联 OPE 分子结的设计合成及导电性质研究

陈忠洋, 门睿茜, 左鑫, 许诗诺, 鄢剑锋*, 袁耀锋*

福州大学化学学院, 福州, 350108

*Email: yanjianfeng@fzu.edu.cn, yaofeng_yuan@fzu.edu.cn

碳硼烷以其独特的类芳香性和优异的化学稳定性, 成为功能分子研究的热点之一。本文以邻碳硼烷作为桥联基团, 设计了一系列OPE分子导线 (A1、A2、B1和B2)。电化学研究表明所有化合物均表现出良好的氧化还原可逆性, 并且当锚定基团处于对位时, 电子传递过程最为明显。利用扫描隧道显微镜分子结裂结 (STM-BJ) 研究了不同类型的锚定基团及其取代位置对单分子电导的影响。结果表明, 分子A1、B1与A2、B2相比具有更高的电导值。

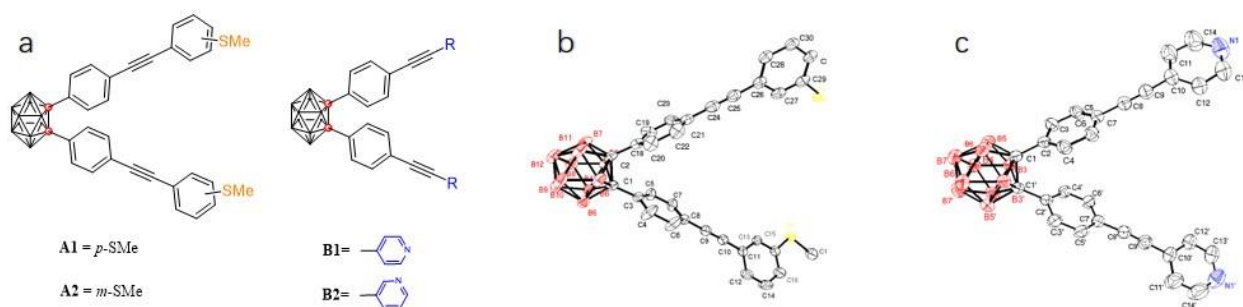


Fig. 1 Molecular structure of A1-A2 and B1-B2(a), ORTEP view of molecular A2(b) and B1(c).

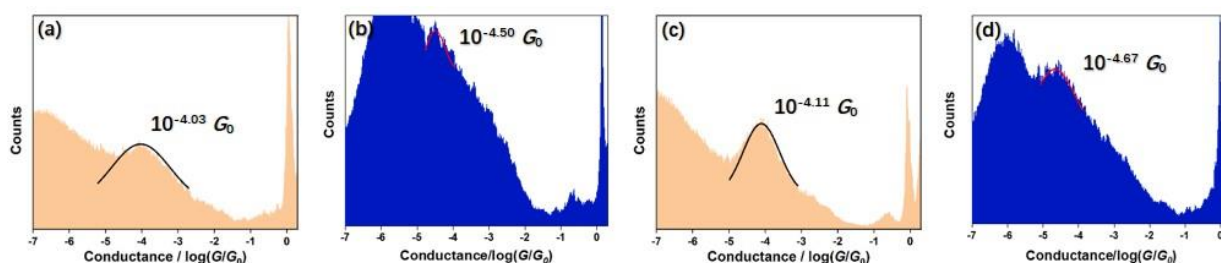


Fig. 2 1D conductance histogram of A1(a), A2(b), B1(c) and B2(d) constructed from 1000 conductance traces without any data selection.

关键词: 邻碳硼烷; OPE; 分子导线; 扫描隧道显微镜裂结技术;

参考文献

- [1] Xu, S. N.; Zheng, Y.; Ye, J. Y.; Chen, Z. Y.; Yan, J. F.; Geng, Y. H.; Hong, W. J.; Yuan, Y. F. *Dalton Trans.* **2023**, DOI: 10.1039/D3DT00011G.
- [2] Tang, C.; Chen, L. J.; Zhang, L. Y.; Chen, Z. X.; Li, G. P.; Yan, Z. W.; Lin, L. C.; Liu, J. Y.; Huang, L. F.; Ye, Y. L.; Hua, Y. H.; Shi, J.; Xia, H. P.; Hong, W. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, **58**: 10601.

简单策略辅助光活性层实现高效有机太阳能电池

程毓君¹, 谌烈^{1,*}

¹南昌大学化学化工学院, 江西省南昌市红谷滩新区学府大道 999 号, 邮编 330031

*Email: chenlie@ncu.edu.cn

通过引入第三组份来构筑三元体系活性层, 是近年来获得高性能有机太阳能电池的有效途径。^[1,2]然而与二元体系相比, 三元体系相组行为更为复杂, 它高度依赖于第三组份的结构和性质以及与其他组分的相容性和相互作用。同时, 三元体系中多相形态导致的器件稳定性问题也十分值得关注。本文提出了一种低聚物辅助光活性层的新概念, 它结合了三元和二元体系的优点, 利用低聚物与主体聚合物结构的相似性和性能的互补性来调控活性层性能。本文设计了一系列基于PM6主体聚合物的低聚物: 二聚体DA、三聚体ADA、DAD和四聚体DADA, 并将其作为第三组分加入到活性层中。研究表明, 将这些低聚物与PM6共混, 可以有效降低HOMO能级, 增强光吸收, 并与PM6形成合金相, 诱导活性层形成更强的 π - π 堆积。最终低聚物辅助的有机太阳能电池的各项参数, 包括Voc、Jsc和FF均有显著提升, 最高器件效率超过18%, 且器件稳定性也得到改善。这些结果表明, 低聚物辅助光活性层策略是实现高效稳定的有机太阳能电池的有效途径。

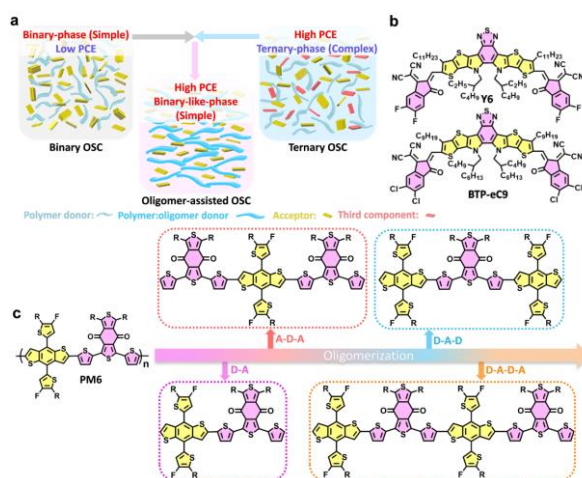


Fig. 1 Schematic diagram of active layer and molecular structure.

关键词: 有机太阳能电池; 器件性能; 器件稳定性

参考文献

[1] Xu X.; Li Y.; Peng Q. *Adv. Mater.* **2021**, *33*, 2107476.

[2] Zhou D.; You W.; Xu H.; Tong Y.; Hu B.; Xie Y.; Chen L. *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*, 23096–23122.

基于功能性第三组分的有机太阳能电池

程沛¹

¹ 四川大学高分子科学与工程学院，成都市一环路南一段 24 号，610065

*Email: chengpei@scu.edu.cn

有机太阳能电池是一种很有前途的太阳能转换技术^[1-3]。近年来，我们设计开发了多种功能性新型第三组分，通过提高器件载流子产生效率^[4-6]，提高器件载流子抽取效率^[7]以及提高器件稳定性^[8, 9]等方式，构筑高性能有机太阳能电池。最近，我们将开发新型第三组分的思想拓展到半透明器件^[10]以及叠层器件^[11]中：

1) 目前直接针对半透明器件活性层设计的新思路与新方法还很欠缺。最近，我们用非常宽带隙的P型聚合物PTAA作为第三组部分取代活性层中宽带隙给体聚合物，从而有效地降低活性层在可见光区吸收，但不会降低其在近红外区吸收。同时，由于PTAA是P型聚合物，它还可以起到给体聚合物的部分作用，包括传输空穴和帮助给受体相分离。使用该方法，我们制得了同时具备20%可见光平均透过率和12%能量转换效率的半透明柔性有机太阳能电池^[10]。

2) 在目前高性能叠层有机太阳能电池的后结电池中，受体一般是窄带隙，而给体通常是中等带隙，当叠层器件工作时，前结电池会大量吸收紫外和可见光，这将会造成后结电池里中等带隙给体吸收的光大量下降，从而使得在给体上的载流子产生数量急剧下降，最终将降低后结电池中给体导电性。基于此，我们在后结电池中引入了窄带隙聚合物给体作为第三组分。因为其带隙窄可在近红外区吸收光子，所以可以提供额外的载流子产生和空穴传输通道。由此，我们将叠层器件的效率从13.5%提高到了15.1%^[11]。

关键词：有机太阳能电池；三元共混；叠层器件；半透明器件

参考文献

- [1] Cheng, P.; Li, G.; Zhan, X.; Yang, Y. *Nat. Photon.* 2018, 12, 131-142.
- [2] Cheng, P.; Zhan, X. *Chem. Soc. Rev.* 2016, 45, 2544-2582.
- [3] Cheng, P.; Yang, Y. *Acc. Chem. Res.* 2020, 53, 1218-1228.
- [4] Cheng, P.; Zhang, M.; Lau, T.-K.; Wu, Y.; Jia, B.; Wang, J.; Yan, C.; Qin, M.; Lu, X.; Zhan, X. *Adv. Mater.* 2017, 29, 1605216.
- [5] Cheng, P.; Wang, J.; Zhang, Q.; Huang, W.; Zhu, J.; Wang, R.; Chang, S. Y.; Sun, P.; Meng, L.; Zhao, H.; Cheng, H. W.; Huang, T.; Liu, Y.; Wang, C.; Zhu, C.; You, W.; Zhan, X.; Yang, Y. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1801501.
- [6] Cheng, P.; Liu, Y.; Chang, S.-Y.; Li, T.; Sun, P.; Wang, R.; Cheng, H.-W.; Huang, T.; Meng, L.; Nuryyeva, S.; Zhu, C.; Wei, K.-H.; Sun, B.; Zhan, X.; Yang, Y. *Joule* 2019, 3, 432-442.
- [7] Cheng, P.; Wang, R.; Zhu, J.; Huang, W.; Chang, S.-Y.; Meng, L.; Sun, P.; Cheng, H.-W.; Qin, M.; Zhu, C.; Zhan, X.; Yang, Y. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1705243.
- [8] Cheng, P.; Yan, C.; Wu, Y.; Wang, J.; Qin, M.; An, Q.; Cao, J.; Huo, L.; Zhang, F.; Ding, L.; Sun, Y.; Ma, W.; Zhan, X. *Adv. Mater.* 2016, 28, 8021-8028.
- [9] Cheng, P.; Yan, C.; Lau, T.-K.; Mai, J.; Lu, X.; Zhan, X. *Adv. Mater.* 2016, 28, 5822-5829.
- [10] Cheng, P.; Wang, H.-C.; Zhu, Y.; Zheng, R.; Li, T.; Chen, C.-H.; Huang, T.; Zhao, Y.; Wang, R.; Meng, D.; Li, Y.; Zhu, C.; Wei, K.-H.; Zhan, X.; Yang, Y. *Adv. Mater.* 2020, 32, 2003891.
- [11] Cheng, P.; Wang, H.-C.; Zheng, R.; Zhu, Y.; Dai, S.; Li, Z.; Chen, C.-H.; Zhao, Y.; Wang, R.; Meng, D.; Zhu, C.; Wei, K.-H.; Zhan, X.; Yang, Y. *Adv. Mater.* 2020, 32, 2002315.

刺激响应性有机发光材料的设计合成及其应用研究

杨湛¹, 黄秋忆¹, 李文朗¹, 罗妙¹, 赵娟², 杨志涌¹, 张艺¹, 池振国^{1,2*}

¹中山大学化学学院, 聚合物复合材料及功能材料教育部重点实验室, 广州市番禺区中山大学东校园
化学材料综合楼, 510006

²中山大学材料科学与工程学院, 广州市番禺区中山大学东校园化学材料综合楼, 510006

*Email: chizhg@mail.sysu.edu.cn

刺激响应性有机发光材料(Stimuli-responsive organic luminescence materials)是指在力、光、电、热、pH等外界刺激作用下, 有机发光材料的发光性能(发光强度、发光颜色、发光寿命等)产生明显响应的一类智能材料。这类基于发射光谱刺激响应的有机发光材料在传感、加密防伪、信息存储、发光器件等领域具有重要的潜在应用, 受到相关领域研究工作者的广泛关注。本报告主要介绍本课题组近年来在刺激响应性有机发光材料方面的最新研究进展, 包括: 1)力刺激发光响应、2)光刺激发光响应、3)电刺激发光响应等^[1-8]。

关键词: 刺激响应性; 有机发光材料; 结构与性能

参考文献

- [1] Huang, Q.; Chen, X.; Li, W.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Zhao, J.; Chi, Z. *Chem* **2023**, DOI: 10.1016/j.chempr.2023.01.013.
- [2] Li, W.; Huang, Q.; Mao, Z.; He, X.; Ma, D.; Zhao, J.; Lam, J. W. Y.; Zhang, Y.; Tang, B. Z.; Chi, Z. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 7423.
- [3] Luo, M.; Zhao, J.; Liu, Y.; Mao, Z.; Wang, S.; Chi, Z. *Adv. Funct. Mater.* **2022**, 2211009.
- [4] Yang, Z.; Ge, X.; Li, W.; Mao, Z.; Chen, X.; Xu, C.; Gu, F. L.; Zhang, Y.; Zhao, J.; Chi, Z. *Chem. Eng. J.* **2022**, **442**: 136219.
- [5] Huang, Q.; Li, W.; Yang, Z.; Zhao, J.; Li, Y.; Mao, Z.; Yang, Z.; Liu, S.; Zhang, Y.; Chi, Z. *CCS Chem.* **2022**, **4**: 1643.
- [6] Huang, Q.; Li, W.; Mao, Z.; Zhang, H.; Li, Y.; Ma, D.; Wu, H.; Zhao, J.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Gong, L.; Aldred, M. P.; Chi, Z. *Chem* **2021**, **7**: 1321.
- [7] Yang, Z.; Xu, C.; Li, W.; Mao, Z.; Ge, X.; Huang, Q.; Deng, H.; Zhao, J.; Gu, F. L.; Zhang, Y.; Chi, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**: 17451.
- [8] Li, W.; Huang, Q.; Mao, Z.; Zhao, J.; Wu, H.; Chen, J.; Yang, Z.; Li, Y.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Aldred, M. P.; Chi, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**: 3739.

直接芳基化缩聚合成高迁移率共轭聚合物

邓云峰^{1,*}

¹ 天津大学材料科学与工程学院, 天津市海河教育园区雅观道 135 号, 300350

*Email: yunfeng.deng@tju.edu.cn,

碳氢 (C-H) 直接芳基化反应是近些年来发展的一类新型偶联反应, 具有原子经济性好、绿色环保等优点, 但用于高性能共轭聚合物的合成面临着以下2个问题: 1) 与C-金属键相比, C-H键的反应活性不高, 导致聚合时间过长, 脱溴、自偶联等副反应会明显影响聚合结果; 2) 在聚合过程中很难保证选择性, 容易产生 β 位支化等结构缺陷。针对这些问题, 我们设计合成了多氟代噻吩衍生物单元, 4F2T, 4FTVT和4FTAT (图1)。氟原子的引入一方面可以提高直接芳基化反应的活性, 另一方面可以引入非共价键弱相互作用, 提高共轭主链的平面性, 增强分子间的相互作用, 提高共轭聚合物的迁移率。将多氟代噻吩衍生物与吡咯并吡咯二酮 (DPP) 和异靛蓝 (IID) 衍生物的直接芳基化缩聚, 制备了系列高分子量共轭聚合物, 并通过机薄膜晶体管器件表征了这些聚合物的半导体性质。由于氟原子的引入降低了共轭聚合物的前线轨道能级, 这些聚合物表现出双极或n型传输特征。

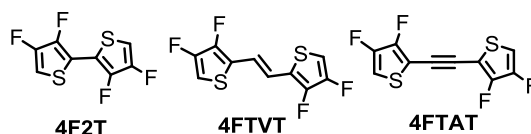


Fig. 1 The chemical structures of multifluorinated thiophene moieties.

关键词: 共轭聚合物; 直接芳基化缩聚; 双极传输; n型传输

参考文献

- [1]. Gao, Y.; Deng, Y.; Tian, H.; Zhang, J.; Yan, D.; Geng, Y.; Wang, F. *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1606217.
- [2]. Guo, K.; Bai, J.; Jiang, Y.; Wang, Z.; Sui, Y.; Deng, Y.; Han, Y.; Tian, H.; Geng, Y. *Adv. Funct. Mater.* **2018**, *28*, 1801097.
- [3]. Chen, F.; Jiang, Y.; Sui, Y.; Zhang, J.; Tian, H.; Han, Y.; Deng, Y.; Hu, W.; Geng, Y. *Macromolecules* **2018**, *51*, 8652.
- [4]. Gao, Y.; Bai, J.; Sui, Y.; Han, Y.; Deng, Y.; Tian, H.; Geng, Y.; Wang, F. *Macromolecules* **2018**, *51*, 8752.

高性能有机热电材料：从精准掺杂到器件功能化

狄重安

中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街二号，100190

*Email: dicha@iccas.ac.cn

有机半导体的载流子可以在电场和温场的驱动下传输，实现热电转换^[1-3]。近年来，有机半导体的热电研究开始得到关注，成为有机电子学的新兴前沿方向。作为处于起步阶段的方向，有机半导体的热电性能研究面临诸多科学问题，其中的关键问题之一就是载流子浓度的高效掺杂与精准调控发展高性能材料体系并实现器件的功能化。本文以有机半导体为研究载体，通过对有机半导体微观结构设计，发展高迁移率有机半导体的电导率和塞贝克系数调控研究，从而揭示相关材料热电关键参数间的制约关系，为有机热电材料体系的发展和性能优化提供支撑。我们结合分子堆积取向调控和分层异质结结构设计，获得了热电优值达0.4的有机半导体薄膜^[4-6]。结合溶液沉积工艺和器件集成技术优化，拓展了在自供电传感、光探测和可穿戴电子器等方面的应用^[6-8]。

关键词：有机半导体；有机热电；分子堆积

参考文献

- [1]. Di, C. A.; Shen, H. G.; Zhang, F. J.; Zhu, D. B., *Acc. Chem. Res.* **2019**, **52** (4): 1113-1124.
- [2]. Wang, D.; Liu, L.; Gao, X.; Di, C.-a.; Zhu, D., *CCS Chem.* **2021**, **3** (10): 2212-2225.
- [3]. Zhao, Y.; Liu, L.; Zhang, F.; Di, C. a.; Zhu, D., *SmartMat* **2021**, **2** (4): 426-445.
- [4]. Wang, D.; Ding, J.; Dai, X.; Xiang, L.; Ye, D.; He, Z.; Zhang, F.; Jung, S. H.; Lee, J. K.; Di, C. A.; Zhu, D., *Adv. Mater.* **2023**, **35** (2): e2208215.
- [5]. Zhu, D. B., *Organic Thermoelectrics*. WILEY-VCH: 2022.
- [6]. Ji, Z.; Zhao, W.; Xiang, L.; Ding, J.; Wang, D.; Dai, X.; Liu, L.; Zhang, F.; Zou, Y.; Di, C.A., *ACS Mater. Lett.* **2022**, **4** (5): 815-822.
- [7]. Zheng, C.; Xiang, L. Y.; Jin, W. L.; Shen, H. G.; Zhao, W.; Zhang, F. J.; Di, C. A.; Zhu, D. B., *Adv. Mater. Technol.* **2019**, **4** (8): 1900247.
- [8]. Zhang, X.; Ding, J.; Wang, D.; Dai, X.; Ma, Y.; Zhao, Y.; Guan, B.; Liu, L.; Zou, Y.; Zhang, F.; Di, C.A., *Small Structures* **2022**, **4** (2): 2200278.

聚合物复合电解质与固态电池性能研究

丁书江*, 陈晶, 孙宗杰

¹西安交通大学化学学院, 西安, 710000

*Email: dingsj@mail.xjtu.edu.cn

离子导电聚合物具有柔韧性好、易加工等优点, 为柔性电子的技术创新和工业应用提供了新的材料基础。然而, 离子导电聚合物的低电导率和弱机械性能限制了它们的进一步发展。调节聚合物的链段运动以及聚合物链和离子之间的相互作用是平衡多组分复合材料的电性能(离子传输)和机械性能(弹性、强度、韧性)的关键。

由聚氧乙烯(PEO)和碱金属盐构成的离子导电聚合物, 离子与聚合物链中的极性基团不断发生络合-解络合, 从而实现迁移过程。提升的离子电导率需要强化聚合物的链段运动能力, 然而伴随产生的机械性能劣化会使电池在循环过程中面临短路风险。因此, 协调聚合物电解质中高载流子数和高强度结构之间的矛盾是本领域的一个难题。本团队从固态电池中的有效载流子与聚合物之间的相互作用入手, 通过聚合物电解质、正极材料的设计制备, 实现了电解质中离子的高效解离与快速传递, 成功构建了高性能固态电池。

关键词: 固态电池; 聚合物电解质; 超分子作用; 有机电极

参考文献

- [1] J. Chen, Y. Gao, **S. Ding*** et al., *Nature Communications*, **2022**, **13**: 4868
- [2] Z. Sun, K. Xi, **S. Ding*** et al., *Nature Communications*, **2022**, **13**: 3209

分子自旋电子器件中的双极化子输运与磁场效应研究

丁帅帅^{1,*}, 于曦¹, 田园², 丁小海¹, 胡文平^{1,*}

¹天津大学, 天津市南开区卫津路 92 号, 300072

²湖南大学, 湖南省长沙市岳麓区麓山南路麓山门, 410082

*Email: dingshuaishuai@tju.edu.cn

*Email: huwp@tju.edu.cn

分子自旋电子学是一门新兴的交叉学科, 旨在利用分子器件中电子的自旋自由度来实现信息处理和存储, 为下一代电子学的发展提供新机遇。我们首先制备了厚度在2-8 nm可控的固态分子结器件, 发现在电荷传输过程中, 分子中的小极化子和深陷阱态导致了双极化子的形成和磁场诱导的 Pauli自旋禁阻现象, 从而实现了正磁电阻响应。该研究还发现, 在薄膜结构中这种正磁阻呈现出严格的厚度依赖性, 为分子尺度器件的磁电功能奠定了基础。此外, 我们还制备了基于有机单晶的磁电阻 (OMAR) 和自旋阀 (OSV) 器件, 该类单晶器件相比于有机薄膜器件在导电性、有序度、自旋输运、磁场响应灵敏度等方面有着不可替代的优势。通过比较不同聚集态结构的自旋电子学器件, 我们揭示了聚集态结构对器件性能的影响, 为提高分子自旋电子器件的性能提供了新思路。最后, 我们总结了目前分子自旋电子学的研究现状, 并展望了未来的研究方向。

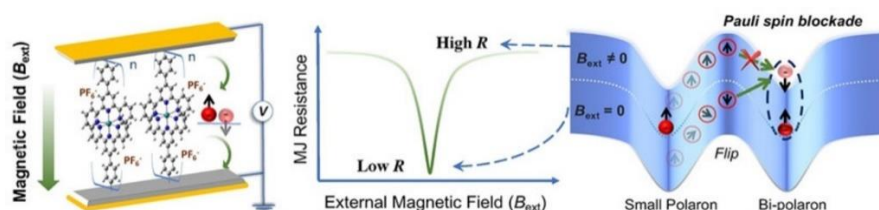


Fig. 1 The bi-polaron transport and magnetic field induced Pauli spin-blockade were revealed in redox-active molecules in molecular junctions (MJ), as evidenced by the magnetoresistance (MR) effect, which may bring new magnetic-electronic functionality to molecular scale electronic devices.

关键词: 分子自旋电子学; 分子结; 自旋阀; 磁电阻; 有机单晶

参考文献

- [1] X. Ding, J. Xue, **S. Ding***, C. Chen, X. Wang, X. Yu*, W. Hu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61**: e202208969.
- [2] Y. Wang, J. Yao, **S. Ding***, S. Guo, D. Cui, X. Wang, S. Yang, L. Zhang, X. Tian, D. Wu, C. Jin, R. Li*, W. Hu, *Sci. China Mater.* **2021**, **64**: 2795.
- [3] **S. Ding**, Y. Tian, Y. Li, H. Zhang, K. Zhou, J. Liu, L. Qin, X. Zhang, X. Qiu, H. Dong, D. Zhu, W. Hu*, *ACS Nano* **2019**, **13**: 9491.

有机/杂化激光材料与器件

董海云

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: donghaiyun@iccas.ac.cn

激光是20世纪人类最重大的发明之一, 在军事、医疗、信息、制造等领域得到了广泛应用。在21世纪人工智能时代, 激光更是一种必不可少的工具, 在光子芯片、激光显示、车载雷达等新兴领域发挥着越来越重要的作用。溶液可加工激光材料有望进一步革新激光技术与应用, 其中有机/杂化半导体由于组分多样性、能级可调性、异质相容性等优点在高性能、多功能微型激光器构筑方面具有显著优势^[1-2]。从特定的激光性能和功能出发, 通过对有机/杂化材料的组分与结构进行设计与调控, 开发了一系列高性能激光材料体系, 在微型激光器的阈值降低、波长调谐、输出控制以及集成应用等方面取得了多项原创性成果。^[3-4]广泛地探索了有机/杂化材料中的光化学与光物理过程, 深入地阐述了有机/杂化激光材料中的结构-性能关系, 对光子学性能和功能导向的有机/杂化微激光器设计与开发具有重要的指导意义。

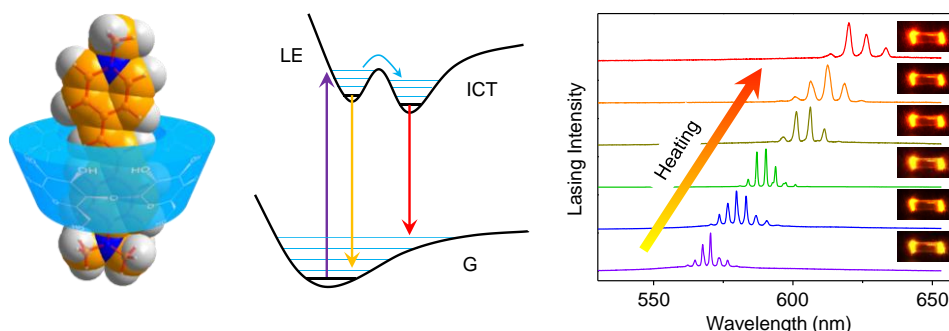


图1. 有机激光材料与器件

关键词: 有机光功能材料; 有机激光; 杂化激光; 激发态过程

参考文献

- [1] W. Zhang, J. Yao, Y. S. Zhao, *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 1691.
- [2] H. Dong, C. Zhang, X. Liu, J. Yao, Y. S. Zhao, *Chem. Soc. Rev.* **2020**, *49*, 951.
- [3] H. Dong, Y. Wei, W. Zhang, C. Wei, C. Zhang, J. Yao, Y. S. Zhao, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1118.
- [4] H. Dong, C. Zhang, W. Nie, S. Duan, C. N. Saggau, M. Tang, M. Zhu, Y. S. Zhao, L. Ma, O. G. Schmidt, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202115875.

高迁移率发光有机高分子半导体材料与器件

董焕丽^{1*}, 高灿¹, 秦正生¹, 刘单¹, 苗扎根¹, 高海阔¹

¹中国科学院化学研究所有机固体实验室, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: dh1522@iccas.ac.cn

有机场效应晶体管 (organic field-effect transistor, OFET) 是有机电路的基本构筑基元, 其大面积集成电路、柔性驱动发光显示、可穿戴电子等领域具有重要应用前景。在 OFET 基础上集成了有机发光二极管 (organic light-emitting diode, OLED) 的有机发光场效应晶体管 (organic light-emitting transistor, OLET) 是既具有场效应晶体管的电流调控和放大功能, 又具有 OLED 的发光显示功能, 具有制备工艺简单、集成度高、电致发光效率高等优势, 其研究具有重要的科学和技术意义。但是, 高效 OLET 器件的构筑需要核心材料体系同时具有高迁移率和强荧光的特性, 但是高迁移率和强荧光是矛盾体, 很难实现二者在同一体系中的有效集成。近期, 我们通过分子设计创新和引入掺杂等策略, 发展了系列高迁移率发光有机半导体材料, 同时实现了对于材料发光颜色和激发态特性的调控, 基于发展的材料体系, 进一步开展的对于其相关发光晶体管等方面的研究。在本报告中, 我将介绍下我们近期在该方面的一些探索性相关研究进展。

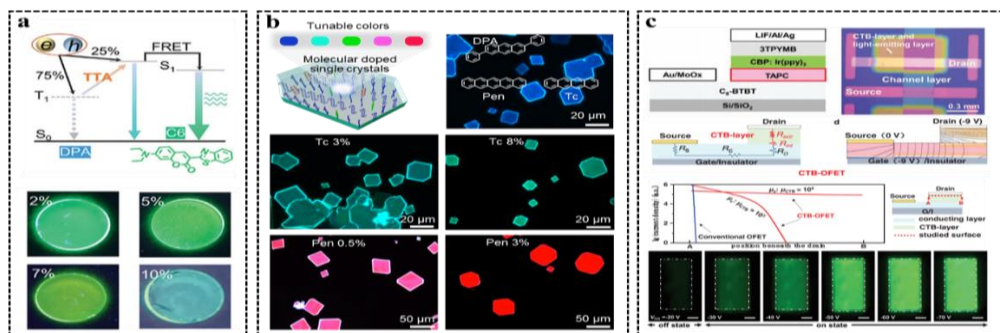


Fig. 1 高迁移率发光有机半导体材料与器件研究

关键词: 有机高分子半导体、高迁移率、强发光、发光晶体管、新型显示

参考文献

- [1]. Qin et al. *Sci. Adv.*, **2022**, 8, eabp8775
- [2]. Qin et al. *Adv Mater.*, **2021**, 33, 2007149
- [3]. Gao et al. *Adv. Mater.*, **2023**, 35, 2208389
- [4]. Gao et al. *Adv. Mater.*, **2021**, 33, 2100704
- [5]. Zhang et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2023**, 1331
- [6]. Liu et al. *Angew. Chem. Int. Ed*, **2022**, 61, e202200791
- [7]. Gao et al. *Adv. Mater.*, **2021**, 33, 2108795
- [8]. Gao et al. *Acta Chimica Sinica*, **2022**, 80, 327
- [9]. Wang et al. *Adv. Mater.*, **2022**, 34, 2105665.
- [10]. Liu et al. *Angew. Chem. Int. Ed*, **2021**, 60, 20274

二维材料可控生长及物性调控的理论研究

董际臣^{1,2,*}, 刘云圻^{1,2,*}

¹ 中国科学院化学研究所, 北京, 100190

² 中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: dongjichen@iccas.ac.cn; liuyq@iccas.ac.cn

二维纳米材料独特的结构及量子限域效应使该类材料在信息与能源等领域具有广泛的应用前景。可控制备高质量二维材料并对其进行有效的物性调控是研究其性质及应用的前提。目前, 化学气相沉积(CVD)在大规模制备二维纳米材料方面表现出巨大潜力, 但该方法涉及多元素跨尺度下热力学及动力学的系统协同调控问题, 深入理解二维纳米材料的CVD机理及物性调控将为其可控制备与应用提供坚实的理论基础。

本次报告将从多尺度理论模拟的角度讲述报告人在二维材料CVD可控制备及物性调控机理方面取得的一些研究进展, 包括: (i) 二维原子晶体的生长动力学机制及多尺度模拟方法的开发; (ii) 制备晶圆级单晶二维材料的机制; (iii) 二维材料结构与物性调控在高效CO₂及电析氢方面的应用机理。

关键词: 二维原子晶体; 多尺度模拟; 化学气相沉积; 可控制备

参考文献

- [1] Dong Jichen, et al., ACS Nano, **2023**, **17**: 127-136.
- [2] Dong Jichen, et al., Nat. Commun., **2020**, **11**: 5862.
- [3] Yao Wenqian, et al., Adv. Mater., **2022**, **34**: 2108608.
- [4] Dong Jichen, et al., Angew. Chem. Int. Ed., **2019**, **58**: 7723-7727.
- [5] Wang Huan, et al., Natl. Acad. Sci. U.S.A., **2023**, **120**: e2219043120.

含硼分子碳及其超分子

窦传冬^{1*}, 郭家祥¹, 袁刘忠¹

¹ 吉林大学超分子结构与材料国家重点实验室, 吉林省长春市前进大街 2699 号, 130012

*Email: chuandong@jlu.edu.cn

基于碳原子sp和sp²杂化态的纳米碳材料, 其发现犹如被打开的一扇扇材料宝库之门, 催生并主导了相关战略新兴产业。分子碳是指结构明确的分子基纳米碳, 其研究对于理解纳米碳材料的结构和物性具有重要意义, 对于合成方法发展和功能材料创制亦具有重要推动作用, 已成为分子科学领域的前沿方向之一。然而, 分子碳研究面临着开壳(双自由基)结构导致其活性高、稳定性差和光电特性调控手段有限等问题, 限制了分子碳化学和材料的发展。

我们以“含硼分子碳化学与材料”为核心研究主题, 围绕“自由基的稳定途径”和“光电特性的调控方法”两个关键科学问题, 通过向分子碳骨架引入sp²杂化的三配位硼, 发展出两类具有组成特色和结构鲜明的含硼有机功能材料[1-5]。提出“反芳香结构硼化稳定自由基”的策略, 开拓出稳定的含硼开壳分子碳, 通过调控三配位硼与碳自由基的共振耦合效应, 实现了双自由基的精准调节和动态调控, 发展出窄带隙功能分子体系, 并探索在光热诊疗方面应用, 为构建有机自由基材料提供了新思路。提出“共轭硼烷可控环合”的方法, 开发出纳米尺度的硼杂分子碳, 不仅报道了目前尺寸最大的二维硼杂稠环和首例结构明确的硼杂分子带, 而且实现了能带结构的有效调控和激发态的动态调控, 获得了从蓝光到深红光(440-720 nm范围)的全色发光, 探索其作为有机激光增益介质应用, 为分子碳领域开辟了新体系和新方向。

关键词: 硼; 分子碳; 超分子; 自由基; 光电材料

参考文献

- [1] J. Guo, Y. Yang, C. Dou, Y. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 18272–18279.
- [2] W. Sun, J. Guo, Z. Fan, L. Yuan, K. Ye, C. Dou, Y. Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e2022092.
- [3] L. Yuan, J. Guo, Y. Yang, K. Ye, C. Dou, Y. Wang, *CCS Chem.* **2022**, DOI: 10.31635/ccschem.022.202101738.
- [4] J. Guo, Z. Li, X. Tian, T. Zhang, Y. Wang, C. Dou, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202217470.
- [5] J. Guo, T. Zhang, Z. Li, K. Ye, Y. Wang, C. Dou, *Chem. Commun.* **2023**, *59*, 2644–2647

Indole-Fused BN-Heteroarenes as Narrowband Blue Emitters for Organic Light-Emitting Diodes

Cheng-Zhuo Du (杜呈卓)¹, Yang Lv¹, Hengyi Dai², Xiangchen Hong², Jianping Zhou², Ji-Kun Li¹, Rong-Rong Gao¹, Dongdong Zhang^{*2}, Lian Duan², Xiao-Ye Wang^{*1}

¹State Key Laboratory of Elemento-Organic Chemistry, Frontiers Science Center for New Organic Matter, College of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071

²Key Lab of Organic Optoelectronics and Molecular Engineering of Ministry of Education, Department of Chemistry, Tsinghua University, Beijing 100084

*Email: ddzhang@mail.tsinghua.edu.cn, xiaoye.wang@nankai.edu.cn

The development of multi-resonance thermally activated delayed fluorescence (MR-TADF) materials has received much attention in recent years. A wide variety of MR emitters have been developed based on the carbazole-fused MR backbone CzBN, realizing multi-color emissions from sky-blue to yellow regions. However, it is still challenging to achieve blue emission via simple structural modification on CzBN, calling for new design concepts of MR skeletons.

Herein, we synthesize a novel indole-fused MR-TADF skeleton (InBN) via π -truncation of CzBN to achieve narrowband blue emission.^[1] The peripheral substitutions can suppress spectral broadening in the solid state and promote device efficiency. Therefore, a highest external quantum efficiency of up to 16.8% with a small FWHM of 29 nm have been achieved in organic light-emitting diodes. This work thus expands the diversity of blue MR-TADF materials and provides new concepts for designing novel BN-heteroarenes with tunable light-emitting properties.

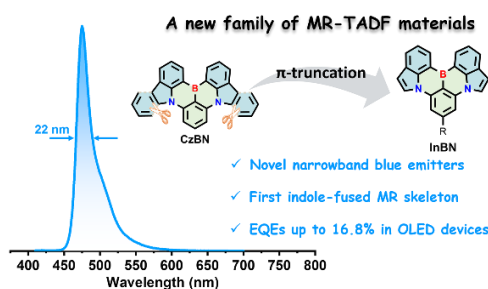


Fig. 1 Molecular design strategy of indole-fused MR-TADF emitters.

Keywords: organic light-emitting diodes, multi-resonance effect, narrowband emission, blue-emitting material, thermally activated delayed fluorescence

Reference

- [1] Cheng-Zhuo Du, Yang Lv, Hengyi Dai, Xiangchen Hong, Jianping Zhou, Ji-Kun Li, Rong-Rong Gao, Dongdong Zhang*, Lian Duan, Xiao-Ye Wang* *J. Mater. Chem. C* **2023**, *11*, 2469.

金属表面功能分子反应选择性机制研究

杜世萱^{1,*}

¹ 中国科学院物理研究所 北京中关村南三街 8 号 100190

*Email: sxdu@iphy.ac.cn

近年来, 将第一性原理计算与扫描隧道显微镜和原子力显微镜实验相结合已成为在原子、分子层次研究表面物理和化学过程的强有力手段。有机分子中相似基团的选择性活化是传统化学合成中的一个历史性难题。我们通过理论计算发现具有C2对称性的含氮多环烃TPPIP分子氮杂环中的四个相同的邻位C(sp³)原子的活性在吸附在Ag(100)上后由于吸附位置的不同活性分为两组, 可以实现C原子的分级脱氢。实验合作者通过非接触原子力显微镜发现了四个C原子的分级脱氢过程 [1]。进一步研究发现, 利用Ag(110)表面可以实现具有高对称性的无金属酞菁分子的线性聚合, 得到分子间通过类碳四元环链接的一维分子线结构[2]。而自组装氟代四苯基卟啉铁(Fe-TPPF)在Au(111)表面环化反应能产生选择性高达90%的手性产物, 理论计算表明, 分子间空间位阻是手性产物选择性大幅提升的主要原因[3]。这一系列工作为利用表面对称性来提高有机分子在金属表面反应的选择性提供了新的思路, 为表面上的不对称合成提供了广泛使用的途径。

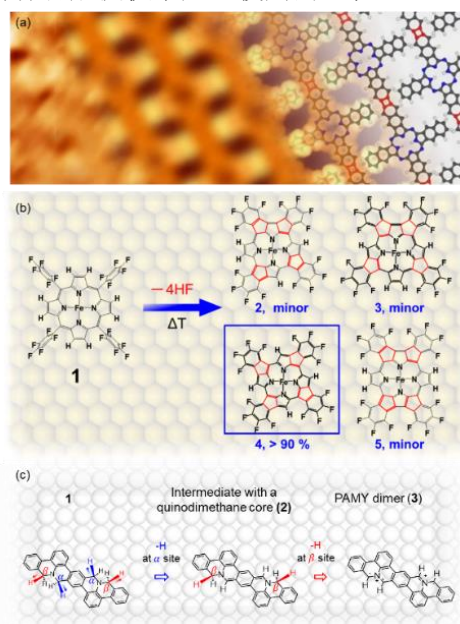


Fig. 1 Molecular reactions on metal substrate. (a) Linear polymerization of NPC on Ag(110); (b) Cyclization of Fe-TPP on Au(111); (c) Selective activation of TPPTP on Ag(100).

关键词: 表面反应, 手性分子, 一维分子链, 第一性原理计算, 扫描隧道显微镜

参考文献

- [1] Wu RT, Bao DL, Yan LH, et al. Construction of poly-naphthalocyanine linked by [4]-radialene-like structures on silver surfaces. *Nano Research* **2021**, *14*: 4563-4568.
- [2] Chen H, Tao L, Wang DF, et al. Stereoselective On-Surface Cyclodehydrofluorization of a Tetraphenylporphyrin and Homochiral Self-Assembly. *Angewandte Chemie-International Edition* **2020**, *59*: 17413-17416.
- [3] Gao Y, Huang L, Cao Y, et al. Selective hierarchical C-H bond activation on surface and enabled formation of N-doped graphene nanoribbons. *Nature Communications*, **2022**, *13*: 6146.

高性能低成本有机太阳能电池关键材料研究

段春晖*

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室，高分子光电材料与器件研究所，广州市五山路 381 号，邮编 510640

*Email: duanchunhui@scut.edu.cn

有机太阳能电池（OSCs）是一种极具商业前景的新型光伏技术。近年来，得益于非富勒烯受体及与之匹配的聚合物给体的开发，OSCs的能量转换效率不断取得突破，目前单结和叠层器件的转换效率均已超过19%。然而，实现OSCs的产业化仍有诸多问题亟待解决：材料方面，目前的高性能给/受体材料普遍存在结构复杂、合成困难的问题；器件方面，OSCs与硅电池、钙钛矿电池等技术相比在性能上还有较大差距，其主要原因是电压损失过大。针对这些问题，我们发展了B-N稠环、氰基噻吩、高结晶性线性D-A聚合物、非稠合聚合物受体等多个原创性的高性能低成本给/受体材料体系。提出“多重共振有机光伏材料”和“近紫外-近红外搭配半透明光伏器件”学术思想，可望为OSCs实现效率新突破与商业应用带来新思路。

关键词： 有机太阳能电池；给体材料；受体材料；能量转换效率

参考文献

- [1] B. Zhang, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2020**, *10*, 1904247.
- [2] X. Yuan, et al. *Energy Environ. Sci.*, **2021**, *14*, 5530.
- [3] X. Yuan, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2023**, *13*, 2204394.
- [4] J. Wang, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2017**, *7*, 1702033.
- [5] X. Liu, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2018**, *8*, 1801699.
- [6] B. Yin, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2022**, *12*, 2104050.
- [7] B. Yin, et al. *Energy Environ. Sci.*, **2022**, *15*, 4789.
- [8] J. Xiao, et al. *Adv. Mater.*, **2021**, *33*, 2008158.
- [9] X. Yuan, et al. *Adv. Funct. Mater.*, **2022**, *32*, 2201142.
- [10] X. Yuan, et al. *Joule*, **2022**, *6*, 647.
- [11] S. Pang, et al. *Adv. Energy Mater.*, **2019**, *9*, 1901740.
- [12] X. Liu, et al. *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 8934.
- [13] Y. Zhang, et al. *Nano Energy*, **2022**, *93*, 106858.
- [14] S. Pang, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, *60*, 8813.
- [15] S. Pang, et al. *Mater. Horiz.*, **2023**, *10*, 473.
- [16] D. Xie, et al. *Adv. Funct. Mater.*, **2023**, *33*, 2212601.

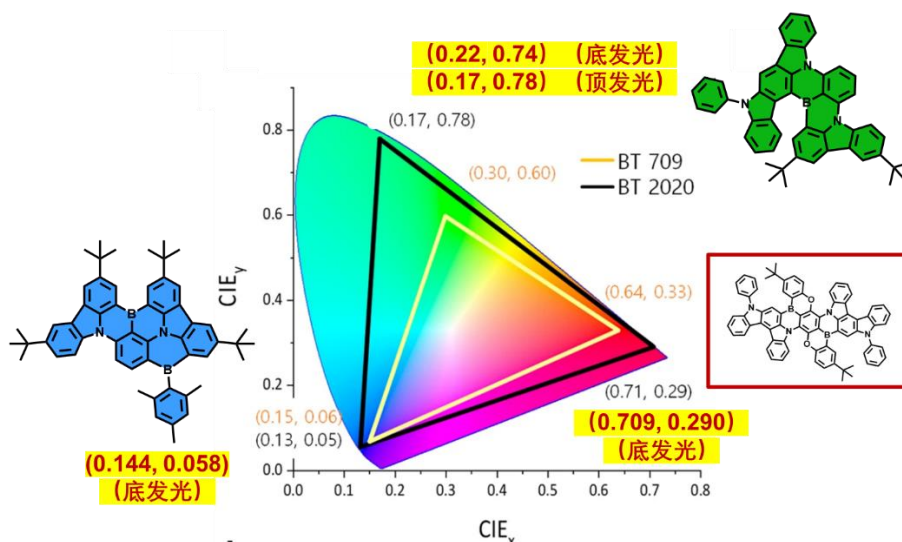
基于热活化敏化荧光（TSF）的广色域 OLED

段炼

¹有机光电子与分子工程教育部重点实验室，清华大学化学系，北京 100084

*Email: duanl@mail.tsingua.edu.cn

有机发光显示（OLED）技术发展迅速，已成为新一代主流的显示技术。近年来，继荧光和磷光材料之后，热活化延迟荧光（TADF）材料引起了广泛的关注。TADF可以通过反向系间窜越使中产生的三线态激子转变为单线态激子并发光，因而可以在不使用重金属配合物的情况下提升器件的发光效率，但TADF材料也存在色纯度差、效率滚降严重缺点。针对上述问题，我们提出了热活化敏化荧光（TSF）的新机制，利用高反向系间窜越的TADF材料敏化窄光谱的荧光染料，制备了高色纯、低电压、高效率、低效率滚降、长寿命的器件，为发展广色域OLED提供了创新思路和方法。



关键词：有机发光二极管，窄光谱，能量传递

高效本征态荧光碳量子点用于电致发光二极管

袁廷, 袁方龙, 张洋, 范楼珍*

¹ 北京师范大学, 北京市海淀区新街口外大街 19 号, 100875

*Email: lzfan@bnu.edu.cn

荧光碳量子点 (CQDs) 具有成本低、环境友好、光热性质稳定等优点, 有望替代传统半导体量子点用于下一代显示技术。然而, 实现接近100%量子产率 (PLQY) 仍然是一项巨大挑战, 制约其进一步实际应用。我们以芘为前驱体, 通过自由基辅助策略, 宏量制备了六边形CQDs (H-CQDs), 荧光PLQY高达96%。像差校正透射电子显微镜 (AC-TEM) 清楚地显示了H-CQDs具有独特的六边形形状, 且表现出完全无缺陷的类石墨烯蜂窝状六角晶格结构。理论计算进一步表明: H-CQDs高度对称的六边形结构, 有助于在垂直方向上产生较大的跃迁偶极矩 ($\mu=4.5$ D), 增大振子强度, 提高辐射复合速率, 从而实现接近100%的PLQY。H-CQDs还具有高达 $0.07\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ 的电子迁移率以及良好的溶液加工性。将H-CQDs与PVK混合作为电致LED的发光层, 当掺杂浓度为3 wt%时, 器件的开启电压、外量子效率和最大亮度分别为3.5 V, 4.6%和 11615 cd m^{-2} 。

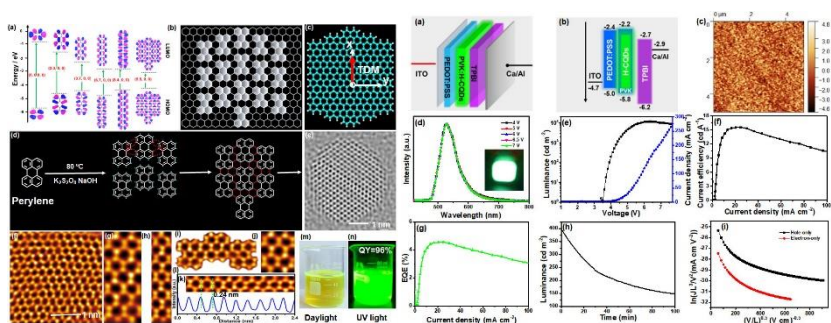


Fig. 1 Structures of H-CQDs and their application in electroluminescent LED

关键词: 碳量子点; 荧光; 电致发光二极管

参考文献

- [1] Yuan F.; Li, S. Fan, Z.; Fan, L.; Yang S., *Nano Today* 2016, 11, 565.
Zhang, S.; Li, S.; Zhou, W.; Zheng, L. *Chem. Phys.* **2011**, **135**: 14304.
- [2] Meng, T.; Wang, Z. Yuan, T.; Li, X.; Li, Y.; Zhang, Y.;* Fan L.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, **60**: 16343.
- [3] Yuan, F.; Yuan, T.; Sui, L., Wang, Z.; Xi, Z.; Li, X.; Li, Y.; Fan L.*; Tan Z., Yang, S. *Nat. Commun.*, **2018**, **9**, 2249.

氰基化 n-型高分子的构筑及性能研究

冯奎^{1,*}, 郭旭岗¹

¹南方科技大学, 广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号, 518055

*Email: fengk@sustech.edu.cn

近年来, 有机半导体材料具有可低成本和大面积制备柔韧性好、超薄、重量轻等优势有机电子器件而备受关注。与广泛研究的p-型有机半导体材料相比, n-型有机半导体材料(特别是n-型高分子)发展十分缓慢。目前, n-型高分子的构建基元主要分为以下四类: 酰胺、酰亚胺、硼氮配位键和氰基功能化的芳环等。其中氰基功能化是一种构建强缺电子基元的新兴策略, 但是由于缺乏溶解性, 其应用十分有限。在此, 我们将氰基引入至苯并噻二唑和双噻吩酰亚胺中构建了两类高性能高分子半导体, 在有机场效应晶体管中获得了最高 $1.72 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的电子迁移率; 在全聚合物太阳能电池中获得了最高13.45%的能量转换效率; 在有机电化学晶体管中获得了最高 $15.2 \text{ F cm}^{-1} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的 μC^* 值; 在n-型有机热电器件中获得了最高 233 Scm^{-1} 的电导率和 $10 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 的功率因子。这些报道充分表明氰基可以用来构建n-型高分子受体材料并取得了优异的器件性能, 也反映了氰基作为强拉电子基团能显著提升高分子的n-型性能。

关键词: 有机电子器件; 有机半导体材料; n-型高分子半导体材料; 氰基功能化

参考文献

- [1] Feng, K.; Guo, H.; Sun, H.; Guo, X. *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*(20): 3804.
- [2] Feng, K.; Guo, H.; Wang, J.; Shi, Y.; Wu, Z.; Su, M.; Zhang, X.; Son, J. H.; Woo, H. Y.; Guo, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*(3): 1539.
- [3] Feng, K.; Shan, W.; Ma, S.; Wu, Z.; Chen, J.; Guo, H.; Liu, B.; Wang, J.; Li, B.; Woo, H. Y.; Fabiano, S.; Huang, W.; Guo, X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*(45): 24198.
- [4] Feng, K.; Huang, J.; Zhang, X.; Wu, Z.; Shi, S.; Thomsen, L.; Tian, Y.; Woo, H. Y.; McNeill, C. R.; Guo, X. *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 2001476.
- [5] Feng, K.; Wu, Z.; Su, M.; Ma, S.; Shi, Y.; Yang, K.; Wang, Y.; Zhang, Y.; Sun, W.; Cheng, X.; Huang, L.; Min, J.; Woo, H. Y.; Guo, X. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31*(5): 202008498.

A Top-down Strategy to Engineer Active Layer Morphology for Highly Efficient and Stable All-polymer Solar Cells

Huiling Fu (付慧婷)¹, Alex K.-Y. Jen^{2*}

¹College of Engineering and Applied Sciences, Nanjing University, 163 Xianlin Road, Qixia District, Nanjing, 210023

²Hong Kong Institute for Clean Energy, City University of Hong Kong, Tat Chee Avenue, Kowloon, Hong Kong, 999077

*Email: alexjen@cityu.edu.hk

A major challenge hindering the further development of all-polymer solar cells (all-PSCs) employing polymerized small-molecule acceptors is the relatively low fill factor (FF) due to the difficulty in controlling active layer morphology. Herein, a facile top-down controlling strategy to engineer the morphology of all-polymer blends is developed by leveraging the layer-by-layer (LBL) deposition. Optimal intermixing of polymer components could be achieved in the two-step process by tuning the bottom-layer polymer swelling during top-layer deposition. Consequently, both the molecular orientation/packing of bottom layer and the crystallinity of top layer can be optimized with a suitable processing solvent for the top layer. Consequently, a favorable morphology with gradient vertical composition distribution for efficient charge transport and extraction is realized, affording a high all-PSC efficiency of 17.0% with a remarkable FF of 76.1%. The derived devices also possess excellent long-term thermal stability which can retain >90% of their initial efficiencies after being annealed at 65 °C for 1300 h. These results validate that the distinct advantages of employing such LBL processing protocol to fabricate high-performance all-PSCs.

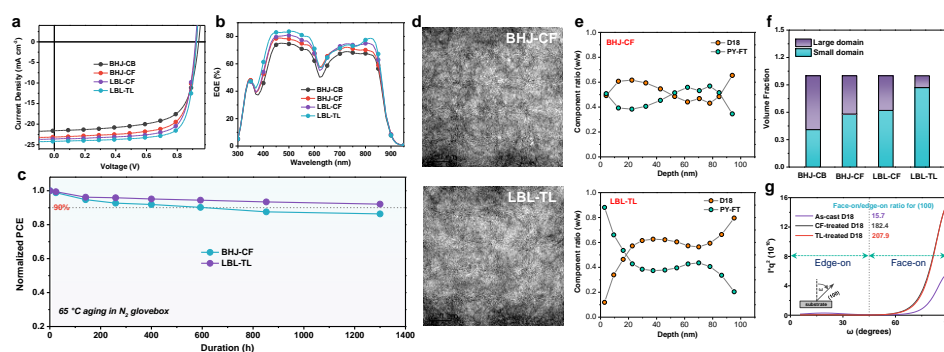


Fig. 1 (a) J - V curves, (b) EQE spectra, and (c) consecutive thermal stability for all-PSCs fabricated with different conditions. (d) TEM images, (e) vertical composition distribution, and (f) domain distributions for all-polymer blend films prepared with different conditions. (g) The pole figure for polymer donor films post-treated with different solvents.

Keywords: all-polymer solar cells, layer-by-layer deposition, blend morphology, power conversion efficiencies, stability

氧化石墨烯基宏观材料及光电子器件

彭鑫， 高超*

¹浙江大学，浙江省杭州市西湖区浙大路 38 号浙江大学高分子大楼，310007

*Email: cgao18@163.com

氧化石墨烯是石墨烯重要的前驱体之一，其良好的分散性以及融合特性使得其成为宏观组装材料的基本构建单元。经过湿法液晶组装，可制备高性能石墨烯纤维、薄膜、气凝胶以及无纺布。其中，具有高取向、高结晶特性的微米以及亚毫米厚石墨烯薄膜材料在导热、导电、电磁屏蔽、无线通信器件、柔性电子等领域广泛应用。当石墨烯薄膜厚度降低至纳米尺度，其可以作为桥梁沟通单层石墨烯性质和宏观组装材料性能。独立支撑、高结晶的组装石墨烯纳米膜（4.2 cm直径，16-50 nm厚度），一方面保留了单层石墨烯中宽光谱吸收以及弱的电子-声子相互作用；另一方面，其体相效应克服了单层石墨烯对电磁波的有限吸收、热电子强的背散射以及强的载流子波动等特性。强化的石墨烯光和物质相互作用改善了电子-电子俄歇复合以及光热电效应。将其和传统半导体集成，在低能量电磁波辐照下，纳米膜极大的扩展了器件响应波长；在高能量x射线辐照下，纳米膜显著提升了器件内量子效率。

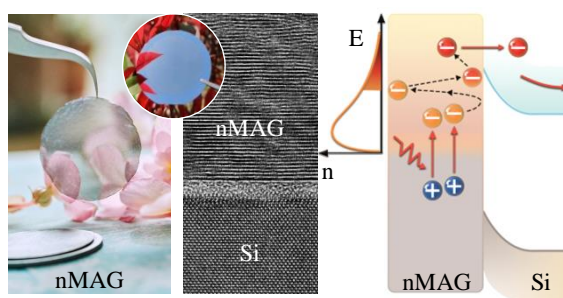


Fig. 1 The photo of nMAG and nMAG/Si wafer (2-inch), HR-TEM image of the nMAG/Si interface, and the corresponding energy-band diagrams of nMAG/Si heterojunction for operation mechanism at mid-infrared region.

关键词：氧化石墨烯；宏观组装；石墨烯薄膜；光电器件

参考文献

- [1] *Science* 2021, 372(6542): 614-617.
- [2] *Chinese J. Polym. Sci.* 2021, 39, 267 - 308.
- [3] *Adv. Mater.* 2021, 33, 2104195.
- [4] *InfoMat* 2022;e12309.

Transition metal complex for hybrid graphene molecular junctions

Tingwei Gao (高廷威)¹, Li Yang^{1*}

¹ Xian Jiaotong Liverpool Univ, Dept Chem, Suzhou 215123

² Xian Jiaotong Liverpool Univ, Dept Chem, Suzhou 215123

*Email: Tingwei.Gao19@student.xjtlu.edu.cn

Molecular electronics have been considered as a promising solution to tackle the physical size limit beyond the conventional electronic devices¹. Wiring a molecule between two electrodes forms a molecular junction (MJ) and it is essential to understand the charge transport of MJ in order to utilize the full potential of the molecular devices. Here, the conductance values of transition metal complex [Fe(pyterpy)₂](PF₆)₂ under Au/Au and Au/Graphene electrodes have been measured using electrochemistry scanning tunneling microscopy *I(s)* method¹ with various potential voltages. The data presented an increase in conductance when using Au/Graphene hybrid electrodes, indicating a new insight of charge transport mechanism.

Keywords: Electronic devices; Molecular junctions; Au/Graphene.

Reference

1. L. Liu, Q. Zhang, S. Tao, C. Zhao, E. Almutib, Q. Algaliby, S. W. Bailey, I. Grace, C. J. Lambert and J. Du, *Nanoscale*, **2016**, 8, 14507-14513.
2. Richard J. Nichols, Wolfgang Haiss, Simon J. Higgins, Edmund Leary, Santiago Martin, Donald Bethell. *Physical chemistry chemical physics*, **2010**, 12, 2801-2815.

基于萹的有机共轭分子材料研究

高希珂*

中国科学院上海有机化学研究所，上海市零陵路 345 号，200032

*Email: gaoxk@mail.sioc.ac.cn

萹（Azulene）是一种蓝色的非苯芳烃化合物，具有非镜像的分子轨道、大的分子偶极矩、反Kasha规则的荧光性质和可逆得失质子等特性^[1]。萹独特的化学结构和物理化学性质有望使其成为构筑新型有机共轭分子材料的理想砌块之一。我们发展了全新结构的联萹二酰亚胺分子材料体系，其作为活性层构筑的有机场效应晶体管电子迁移率与非晶硅相当，是目前性能最优的萹基n-型有机半导体^[2]。研究表明：萹单元偶极诱导的分子紧密堆积结构是材料具有高电子迁移率的原因之一。近期发展的基于2,6-萹单元的共轭聚合物表现出动态可逆的质子响应性质、高的酸掺杂导电性和质子传输性能^[3]。非苯芳烃类有机共轭分子材料一直备受关注。我们以萹为基本结构单元之一，构筑了萹基氮杂多环芳烃和嵌萹螺烯分子，其具有独特的物理化学性质和分子功能^[4,5]。萹基有机共轭分子材料有望在质子导电材料、有机铁电材料、单分子器件材料、新型发光/光热材料和碳纳米材料等方面发挥其独特优势。

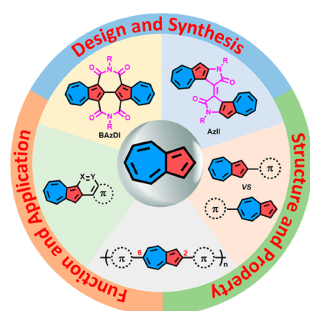


Fig. 1 Azulene-based organic conjugated molecular materials.

关键词：萹；偶极矩；质子响应；有机半导体；有机导体

参考文献

- [1] Xin, H.; Hou, B.; Gao, X. *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*: 173.
- [2] Xin, H.; Ge, C.; Jiao, X.; Yang, X.; Rundel, K.; McNeill, C. R.; Gao, X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*: 1322.; Xin, H.; Li, J.; Ge, C.; Yang, X.; Xue, T.; Gao, X. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*: 975.
- [3] Hou, B.; Zhou, Z.; Yu, C.; Xue, X.-S.; Zhang, J.; Yang, X.; Li, J.; Ge, C.; Wang, J.; Gao, X. *ACS Macro Lett.* **2022**, *11*: 680.
- [4] Xin, H.; Li, J.; Lu, R.-Q.; Gao, X.; Swager, T. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 13598.
- [5] Duan, C.; Zhang, J.; Xiang, J.; Yang, X.; Gao, X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202201494.

锡基钙钛矿在室内光伏方面的应用

高震¹, 王军方¹, 吕明升¹, 杨成林¹, 孙昌族¹, 孟祥悦^{1,*}

¹ 中国科学院大学, 北京, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

室内光伏是发挥太阳能光伏分布特性的领域。现在通过物联网可以实现电子设备的互联和基于这种连接的智能信息处理, 由于这些系统大多在室内运用, 一个稳定的、连续的室内能源是必不可少的。锡基钙钛矿太阳能电池具有优异的光学和电学性能, 特别适合于太阳能电池的应用, 它是最有前途的替代有毒铅化合物的候选材料。此外, 与铅基钙钛矿相比, 锡基钙钛矿具有类似或更优越的电子和光学性能, 如更高的载流子迁移率和长寿命的热载流子。因此, 锡基钙钛矿在开发高效太阳能电池方面具有巨大的潜力。通过调整锡基钙钛矿材料中阴离子的比例可以调节材料的带隙宽度, 从而得到适合室内光伏的宽带隙锡基钙钛矿 $\text{FA}_{0.75}\text{MA}_{0.25}\text{SnI}_2\text{Br}$ 。进一步地, 对锡基钙钛矿 $\text{FA}_{0.75}\text{MA}_{0.25}\text{SnI}_2\text{Br}$ 的成核过程进行优化, 得到低缺陷密度、高结晶质量的薄膜, 从而提高室内光伏器件的效率, 得到效率15%以上的室内光伏器件。

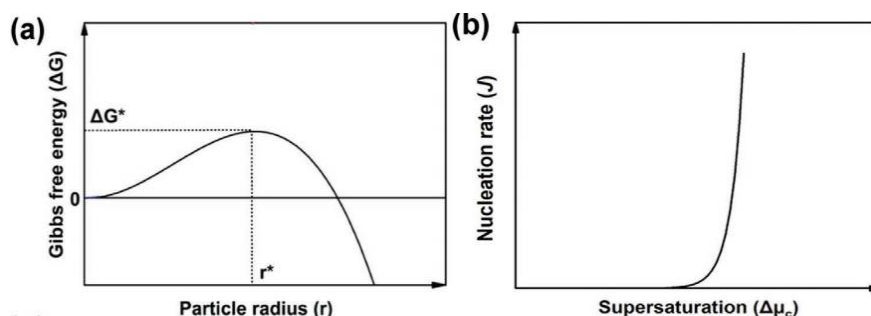


Fig. 1 a) Schematic free energy profiles for the classical nucleation theory. b) Plot of the nucleation rate versus the supersaturation.

关键词: 锡基钙钛矿; 室内光伏; 成核

参考文献

- [1] Wang, J.; Yang, C.; Chen, H.; Lv, M.; Liu, T.; Chen, H.; Xue, D-J.; Hu, J-S.; Han, L.*; Yang, S.*; Meng, X.* *ACS Energy Lett.* **2023**, *8*: 1590-1596.
- [2] Wang, J.; Gao, Z.; Yang, J.; Lv, M.; Chen, H.; Xue, D-J.; Meng, X.*; Yang, S.* *Adv. Energy Mater.* **2021**, *11*: 2102131.

二噻吩并茈二酰亚胺类有机半导体材料设计合成与光电功能研究

葛从伍^{1,*}, 赵学千¹, 黄金涛¹, 高希珂^{1,*}¹中国科学院上海有机化学研究所, 上海市零陵路 345 号, 200032

*Email: gecongwu@sioc.ac.cn, gaoxk@mail.sioc.ac.cn

构建给体-受体 (D-A) 结构是获得高性能有机光电功能材料的有效策略, 目前受体单元仍局限于传统的有机染料/颜料分子骨架, 发展明显滞后, 且缺乏分子设计规律, 这在很大程度上制约了新型高性能有机半导体材料的发展。近年来, 受体单元结构异构的设计理念在发展高性能多功能有机半导体材料中得到成功应用^[1]。1,2,5,6-NDI与1,4,5,8-NDI互为结构异构体, 我们基于1,2,5,6-NDI母核, 利用核 π -扩展的策略, 发展了新型共轭分子骨架: 二噻吩并茈二酰亚胺 (DTCDI), DTCDI具有扭曲的分子骨架和强的化学衍生性 (X、Y多个活性反应位点), 可用于构筑可溶液加工、结构多样的有机共轭小分子和聚合物^[2]。如图1所示, 我们通过在DTCDI分子骨架的不同位置引入氰基精细调控了分子轨道能级, 其中四氰基取代的DTCDI衍生物(DTCDI-4CN)具有低的LUMO能级, 其有机场效应晶体管(OFETs)器件电子迁移率可达 $0.25 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ^[3]。随后, 我们实现了DTCDI不同反应位点的高分子化, 发展了基于DTCDI的特色聚合物体系, 获得了高性能、多功能的n-型聚合物半导体材料。其中DTCDI的X-位与联二噻吩共聚物P2表现为空穴和电子迁移率较为平衡的双极性半导体, 而DTCDI的Y-位与联二噻吩共聚物P1为n-型有机半导体, 基于P1的OFETs器件电子迁移率达到 $0.11 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。以P1为受体, PTB7-Th为给体的全聚合物太阳能电池未经任何退火处理, 能量转化效率高达7.52%, 这是目前全聚合物太阳能电池较高能量转化效率之一^[4]。P1作为钙钛矿太阳能电池 (PVs) 的电子传输材料, 电池能量转化效率可达18% (优于n-型明星小分子PCBM和聚合物N2200的性能)^[5]。研究表明: DTCDI有望成为构建有机半导体的理想砌块, 在构建高性能、多功能聚合物光电材料方面具有发展潜力。

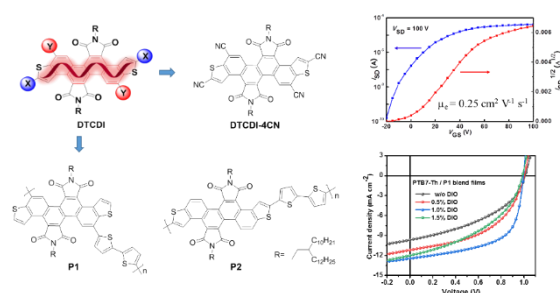


Fig. 1 DTCDI-based organic semiconductors and their optoelectronic device performance

关键词: 有机光电功能材料; D-A结构; 二噻吩并茈二酰亚胺; n-型聚合物; 电子传输材料
参考文献

- [1] Zhao, Z.; Zhang, F.; Zhang, X.; Yang, X.; Li, H.; Gao, X.; Di, C.; Zhu, D. *Macromolecules* **2013**, *46*: 7705.
 [2] Zhao, Z.; Ge, C.; Zhao, X.; Huang, J.; Gao, X. *Chin. J. Chem.* **2022**, *40*:10.1002/cjoc.202200689.
 [3] Zhao, X.; Ge, C.; Yang, X.; Gao, X. *Mater. Chem. Front.* **2017**, *1*: 1635.
 [4] Zhao, X.; Ge, C.; Xu, X.; Huang, J.; Yang, X.; Peng, Q.; Li, W.-S.; Gao, X. *Chem. Commun.* **2019**, *55*: 10234.
 [5] Huang, J.; Ge, C.; Qin, F.; Zhang, J.; Yang, X.; Zou, Y.; Zhou, Y.; Li, W.-S.; Gao, X. *J. Mater. Chem. C*, **2022**, *10*: 2703.

高效率有机太阳能电池研究

陈振宇, 叶勤睿, 葛金峰, 宋伟, 葛子义*

中科院宁波材料所, 宁波市镇海区中官西路 1219 号, 315201

*Email: geziyi@nimte.ac.cn

有机太阳能电池 (OSC) 具有低价、柔性、半透明和弱光响应等优点, 其效率主要取决于界面层、活性层和器件工艺等三个要素。首先, 我们创新性开发了一类湿法加工的低价非共轭小分子电解质作为 OSC 的界面材料, 替代传统的蒸镀型界面和昂贵的有机共轭类界面材料, 突破了单结富勒烯 OSC 10%效率瓶颈。在活性层材料方面, 制备了系列新型非富勒烯受体, 利用共混调节活性层形貌和吸光光谱, 获得了单结 17%效率的非富勒烯 OSC; 此外, 制备了新型小分子给体材料, 通过分子结构调控和溶剂退火等器件处理工艺, 获得了 16.3%效率的全小分子 OSC。在柔性器件工艺上, 制备了全湿法无 ITO 的柔性电池, 效率达到 16%以上, 且耐 1000 次以上弯折。在 OSC 应用研究方面, 通过多羟基化合物掺杂和酸处理制备高性能的柔性透明电极, 获得了高效率柔性半透明 OSC, 并应用于模拟温室, 用于植物生长, 实现光伏共享。此外通过三元共混调控策略, 制备的刚性 OSCs 效率达到 19.2%, 柔性 OSCs 效率达到 18%以上。

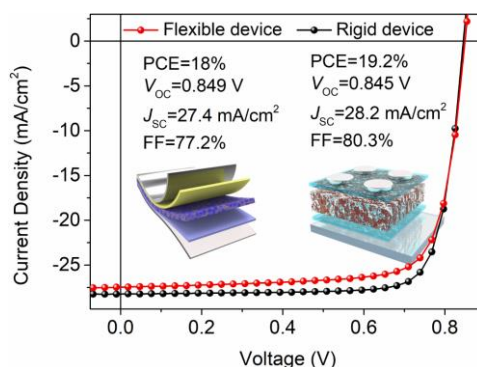


Fig. 1 Efficient OSCs with rigid 19.2% and flexible 18% efficiency

关键词: 有机太阳能电池; 界面调控; 柔性

参考文献

- [1] X. Ouyang, R. Peng, L. Ai, X. Zhang, Z. Ge*, *Nat. Photon.*, **2015**, *9*, 520.
- [2] T. Yan, W. Song, Z. Ge* et al, *Adv. Mater.*, **2019**, *31*, 201902210.
- [3] J. Ge, L. Xie, Z. Ge* et al, *Angew. Chem.*, **2020**, *59*, 2808.
- [4] Z. Chen, W. Song, Z. Ge* et al, *Joule*, **2021**, *5*, 2395.
- [5] J. Ge, Z. Ge* et al, *Adv. Mater.*, **2022**, *34*, 2202752.

用于多级解码模式的超低功耗有机垂直晶体管

张晴¹, 耿德超^{1,*}, 胡文平^{1,*}

¹天津大学理学院化学系天津市分子光电子科学重点实验室, 天津 300072

*Email: gengdechao_1987@tju.edu.cn; huwp@tju.edu.cn

类脑计算具有大规模并行计算、低功耗、能处理非结构问题等优点, 有望解决冯诺依曼瓶颈, 成为现代计算体系的中流砥柱。场效应晶体管的栅电压可以被视为突触前信号, 而受栅电压调控的沟道电流可以被视为突触后信号, 因此越来越多的场效应晶体管被用于模拟生物突触的功能。其中, 有机材料来源广泛、可溶液加工、具有本征柔性等特点, 因此基于有机场效应晶体管的三端突触晶体管受到了广泛的关注。然而, 低性能和高功耗是限制其实际应用的两个主要问题。我们提出了一种具有超低运行功耗的基于过渡金属碳化物(MXene)和有机单晶的垂直晶体管, 在-1 mV的超低运行电压下, 表现出16.6 mA/cm²的高开态电流和 9.12×10^5 的高开比。在电调制模式下, 该器件表现出典型的突触功能, 包括可重构短期塑性(STP)、脉冲幅度依赖可塑性(SADP)和双脉冲抑制(PPD)等, 并且每脉冲仅消耗8.7 aJ的能量。这项工作促进了垂直晶体管和有机单晶在模拟生物突触领域的应用, 也促进了低功耗类脑计算体系的进步。

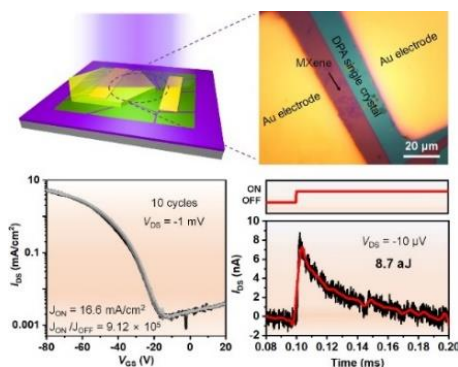


Fig. 1 MXene-organic single crystal vertical transistor exhibits a fast switching characteristic under an ultralow operating voltage of -1 mV meanwhile consumes only 8.7 aJ per spike when working as electrical synaptic transistor.

关键词: 超低功耗; 人工突触; 有机垂直晶体管; 微距升华法

参考文献

- [1] Zhang, Q.; Li, E.; Wang, Y.; Gao, C.; Wang, C.; Li, L.; Geng, D.; Chen, H.; Chen, W.; Hu, W. *Adv. Mater.* **2023**, *35*: 2208600.

A Novel Strategy toward Thermally Activated Delayed Fluorescence from A Locally Excited State

Hua Geng (耿华)*¹, Qian Peng*²

¹Department of Chemistry, Beijing Advanced Innovation Center for Imaging Theory and Technology, Capital Normal University, Beijing, 100048.

² School of Chemical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049.

*Email: hgeng@iccas.ac.cn; qpeng@iccas.ac.cn

It is well-known that thermally activated delayed fluorescence (TADF) is always generated from charge-transfer (CT) excited states in donor–acceptor (D–A) systems, which limits its application owing to a slow radiative process and a small stimulated emission cross section. Herein, a design strategy is proposed for realizing TADF from a locally excited (LE) state without a typical donor–acceptor type structure through controlling the intersystem crossing (ISC) and reverse intersystem crossing (RISC) processes between the lowest excited singlet with LE character and higher triplet states. Using this strategy, a boron difluoride derivative is theoretically predicted and experimentally synthesized to exhibit locally excited TADF (LE-TADF) with a fairly large radiative rate of $1.12 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, extremely fast RISC rate of $5.09 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, and a large stimulated emission cross section of $4.35 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, making this a promising organic amplified spontaneous emission (ASE) material. This work might open a new avenue to extend TADF materials, especially TADF laser emitters.

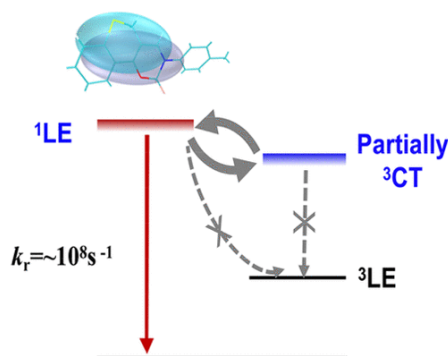


Fig. 1 TADF from a locally excited(LE) state

Keywords: Thermally activated delayed fluorescence, Amplified spontaneous emission, Thermal vibration correlation function, Radiative and nonradiative decay rates.

Reference

[1] Jingyao Chen,[‡] Xiaoxiao Xiao,[‡] Shuai Li,[‡] Yuai Duan, Guo Wang, Yi Liao,* Qian Peng,* Hongbing Fu, Hua Geng,* and Zhigang Shuai, *J. Phys. Chem. Lett.* 2022, 13, 2653–2660.

From TADF single crystal laser to phosphorescent thin film

OLEDs

宦浩, 付红兵*

首都师范大学, 北京市海淀区八里庄街道西三环北路 105 号, 100048

*Email:2220701002@cnu.edu.cn

有机半导体激光器(OSLs)和有机发光二极管(oled)是未来显示和照明技术中很有前途的光源。商用oled利用昂贵的含贵金属的磷光发射器, 通过利用以3:1比例产生的三态(T1)和单态(S1)激子来实现高效的电致发光。电注射OSLs仍然具有挑战性, 受到有机荧光增益介质(激光染料)的阻碍, 有机荧光增益介质不能利用, 并且经常遭受三联淬灭。在这里, 我们报道了 (D-A-D)型的无金属有机室温磷光(ORTP)发射器的设计和演示。在晶体状态下, 分子具有优异的热激活延迟荧光(TADF)激光发射性能, 薄膜状态通过形成h偶联二聚体实现高效的磷光发射。因此, 在不同的guest-host薄膜中实现了高达61%的高效率ORTP, 从而促进了外部量子效率接近20%的高效溶液处理oled。这项研究为设计TADF有机固态微激光器和电注入ORTP发射器提供了可能性。

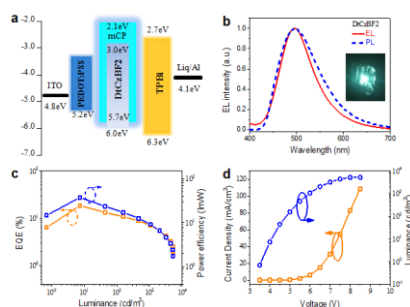


Fig. 1 a. Typical OLED structure and energy level diagram. b. Normalized EL (solid line) and PL (dashed line) spectra of films. c. EQE (left) and power efficiency (right) versus current density. d. The luminance and current efficiency based

OLEDs

关键词: OLED; 磷光; 激光

参考文献

- [1] C. W. Tang, S. A. Vanslyke, *Appl. Phys. Lett.* **1987**, *51*, 913-915.
- [2] Tessler, N., Denton, G. J., Friend, R. H. Lasing from conjugated-polymer microcavities. *Nature* **382**, 695–697 (1996).
- [3] X. Ou, X. Qin, B. Huang, J. Zan, Q. Wu, Z. Hong, L. Xie, H. Bian, Z. Yi, X. Chen, Y. Wu, X. Song, J. Li, Q. Chen, H. Yang, X. Liu, *Nature* **2021**, *590*, 410-415.
- [4] T. Matsuzawa, Y. Aoki, N. Takeuchi, *J. Electrochem. Soc.* **1996**, *143*, 2670-2673.

高效热活化延迟荧光材料与器件

龚少龙^{1,*}, 应翱¹, 杨楚罗²

¹ 武汉大学, 武汉市武昌区八一路 299 号, 430072

² 深圳大学, 深圳市南山区学苑大道 1066 号, 518071

*Email: slgong@whu.edu.cn

在有机发光二极管 (OLED) 中, 空穴和电子复合会产生 25% 的单重态激子和 75% 的三重态激子, OLED 效率很大程度上取决于发光材料的激子利用率。因此, 开发高激子利用率的发光材料一直是 OLED 领域最为基础和重要的研究课题。目前, 热活化延迟荧光 (TADF) 材料由于其高激子利用率和低成本等优势, 成为继重金属配合物磷光材料之后最具发展潜力的第三代有机发光材料之一^[1,2]。

近五年来, 我们团队发展了多种分子设计策略 (包括动态质子转移和主客体相互作用等) 来调控 TADF 材料的激发态能级特性 (包括发光颜色、发光效率、延迟寿命等), 获得了一系列高效 TADF 材料体系^[3,4]。在此基础上, 我们团队提出了分子长轴延伸和受体平面拓展的新途径来控制 TADF 材料的激发态空间取向, 获得了跃迁偶极距水平取向度超过 80% 的多色新型 TADF 材料, 实现了最大外量子效率均超过 25% 的多色 TADF 器件^[5,6]。最近, 我们团队发展了几类新型的卡宾铜 TADF 发光材料/敏化剂, 实现了低效率滚降的高效 OLED^[7-9]。

关键词: 有机发光二极管; 热活化延迟荧光; 激发态调控

参考文献

- [1] Uoyama, H.; Goushi, K.; Shizu, K.; Nomura, H.; Adachi, C. *Nature* **2012**, **492**: 234.
- [2] Wong, M. Y.; Zysman-Colman, E. *Adv. Mater.* **2017**, **29**: 1605444.
- [3] Wu, K.; Zhang, T.; Wang, Z.; Wang, L.; Zhan, L.; Gong, S.; Zhong, C.; Lu, Z.-H.; Zhang, S.; Yang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, **140**: 8877.
- [4] Zhan, L.; Chen, Z.; Gong, S.; Xiang, Y.; Ni, F.; Zeng, X.; Xie, G.; Yang, C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, **58**: 17651.
- [5] Zeng, W.; Lai, H.-Y.; Lee, W.-K.; Jiao, M.; Shiu, Y.-J.; Zhong, C.; Gong, S.; Zhou, T.; Xie, G.; Sarma, M.; Wong, K.-T.; Wu, C.-C.; Yang, C. *Adv. Mater.* **2018**, **30**: 1704961.
- [6] Xiang, Y.; Li, P.; Gong, S.; Huang, Y.-H.; Wang, C.-Y.; Zhong, C.; Zeng, W.; Chen, Z.; Lee, W.-K.; Yin, X.; Wu, C.-C.; Yang, C. *Sci. Adv.* **2020**, **6**: eaba7855.
- [7] Ying, A.; Huang, Y.-H.; Lu, C.-H.; Chen, Z.; Lee, W.-K.; Zeng, X.; Chen, T.; Cao, X.; Wu, C.-C.; Gong, S.; Yang, C. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, **13**: 13478.
- [8] Zhan, L.; Ying, A.; Qi, Y.; Wu, K.; Tang, Y.; Tan, Y.; Zou, Y.; Xie, G.; Gong, S.; Yang, C. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, **31**: 2106345.
- [9] Ying, A.; Ai, Y.; Yang, C.; Gong, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61**: e202210490.

二聚化电子受体的构象调控实现高效、稳定和低能量损失的有机太阳能电池

古晓斌¹, 张昕^{1,*}, 黄辉^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京市怀柔区雁栖湖东路1号, 101408

²工作单位, 地址, 邮编

*Email: Email: zhangxin2019@ucas.ac.cn; huihuang@ucas.ac.cn.

最近, 国内外研究人员提出将高性能非富勒烯受体作为单体, 中间采用 π 桥单元连接构建寡聚化受体 (通常是稠环电子受体的二聚体) 的策略, 这类材料可以结合小分子和聚合物的优点, 兼具明确的分子结构和良好的批次重复性, 在保持良好稳定性的同时表现出显著增强的光伏性能($>18\%$)^{1,2}。然而, 其单体与 π 桥之间可旋转的 σ 单键影响了分子骨架整体的平面性, 不利于形成有序分子堆积和高效的电荷传输, 严重限制光电转换效率的进一步提升。因此, 如何有效调控二聚化受体的平面构象从而构建高性能受体材料是急需解决的科学问题。

本工作通过精细调控二聚化电子受体的分子构象, 成功构建了高效、稳定和低能量损失的有机太阳能电池。针对二聚化电子受体中额外引入单键导致分子骨架扭曲的问题, 逐渐引入 $S\cdots F$ 非共价“构象锁”(NoCLs)增强分子的平面性和刚性, 从而降低重组能, 形成更紧密和更有序分子间堆积。得益于四重 $S\cdots F$ NoCLs的引入, 基于DYF-TF二聚化电子受体的有机太阳能电池器件获得了高达18.26%的光电转化效率和极低的能量损失(0.493 eV), 创造了目前基于寡聚化电子受体有机太阳能电池的最高纪录效率。此外, 基于DYF-TF的二元器件表现出良好的稳定性($T_{80\%} = 2681$ h), 其三元器件的光电转换效率更是进一步提升到18.73%。本工作对进一步提高寡聚化电子受体的光电转换效率提供了新思路, 也再一次证明了非共价“构象锁”策略在设计高性能有机太阳能电池材料方面的巨大潜力。

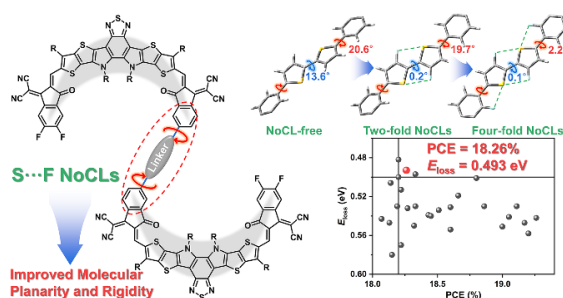


Fig. 1 Chemical structure and photovoltaic properties of dimerized acceptors in this work

关键词: 有机太阳能电池; 二聚化受体; 构象调控; 非共价构象锁; 低能量损失

参考文献

- 1 H. Wang, C. Cao, H. Chen, H. Lai, C. Ke, Y. Zhu, H. Li and F. He, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, **61**, e202201844.
- 2 W. Liu, J. Yuan, C. Zhu, Q. Wei, S. Liang, H. Zhang, G. Zheng, Y. Hu, L. Meng, F. Gao, Y. Li and Y. Zou, *Sci. China Chem.*, 2022, **65**, 1374-1382.

有机/高分子光功能材料的聚集态结构设计和激发态性质调控

顾星桂^{1,*}

¹北京化工大学 材料科学与工程/软物质高精尖中心, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 100029

*Email: guxinggui@mail.buct.edu.cn

有机/高分子光功能材料作为一种新兴的先进功能材料, 在生命健康和能源等领域具有广泛的应用前景。其应用往往是在聚集态下, 因此, 研究其聚集态相关结构设计和性质调控显得尤为重要。为此, 我们针对有机/高分子光功能材料的聚集态, 围绕“Aggregation Microenvironment (AME, 聚集微环境)”, 探究材料聚集形成的微环境与性能关系, 探索功能导向拓扑结构的高效构筑, 开发激发态性能优越的有机/高分子光功能材料。已取得一定进展: 提出结晶诱导激发态“暗-亮”态反转新机制, 解决了传统发光材料所面临的ACQ难题, 进一步发展了“软多孔有机晶体”[1, 2]; 率先开发具有聚集态稳定双自由基特征和自由基属性精准调控、近红外宽光谱吸收、高效光热转换的新型有机小分子光热材料, 应用于太阳能高效利用和生物医学诊疗等方面[3-5]; 建立系列有机晶体和聚合物中聚集微环境演变的荧光可视化监测新方法, 首次通过实验验证“自稳定沉淀聚合”机理, 并构建系列生物医用光功能微球材料[6, 7]。

关键词: 聚集态; 聚集微环境; 软多孔有机晶体; 双自由基; 荧光可视化

参考文献

- [1] Li, L.; Ma, H.; Zhang, J.; Zhao, E.; Hao, J.; Huang, H.; Li, H.; Li, P.; Gu, X.*; Tang, B. Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143**: 3856.
- [2] Yang, S.#; Yin, P.-A.#; Li, L.; Peng, Q.*; Gu, X.*; Gao, G.; You, J.; Tang, B. Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**: 10136.
- [3] Chen, G.#; Sun, J.#; Peng, Q.; Sun, Q.; Wang, G.; Cai, Y.; Gu, X.*; Shuai, Z.; Tang, B. Z.* *Adv. Mater.* **2020**, **32**, 1908537.
- [4] Zhu, X.#; Li, L.#; Tang, J.#; Yang, C.; Yu, H.; Liu, K.; Zheng, Z.; Gu, X.*; Yu, Q.*; Xu, F.-J.; Gan, Z. *Biomaterials* **2022**, **280**: 121305.
- [5] Sun, J.#; Zhao, E.#; Liang, J.; Li, H.; Zhao, S.; Wang, G.; Gu, X.*; Tang, B. Z. *Adv. Mater.* **2022**, **34**: 2108048.
- [6] Wang, G.; Yu, H.; Yang, L.; He, Z.; Zhou, L.; Sun, J.; Gu, X.*; Yang, W.; Tang, B. Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 25246.
- [7] Wang G.#; Zhou L.#; Zhang P.#; Zhao E.; Zhou L.; Chen D.; Sun J.; Gu X.*; Yang W.; Tang B. Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**: 10122.

多材料智能打印柔性电子器件

郭双壮^{1,*}

¹广州市柔性电子材料与可穿戴设备重点实验室, 聚合物复合材料及功能材料教育部重点实验室, 中山大学材料科学与工程学院, 广州 510275

*Email: guoshzh3@mail.sysu.edu.cn

柔性电子器件的制造往往需要一系列加工过程, 比如旋涂、光刻、金属沉积以及刻蚀等等, 这些复杂步骤一方面增加了操作难度和生产成本, 另一方面也限制了电子器件在柔性有机基底上的应用。比如高温烧结、化学腐蚀等操作就无法在水凝胶、生物组织表面或者工作温度较低的高分子表面来生产柔性电子器件。与传统的无机半导体材料相比, 聚合物半导体材料的显著优势是可以采用溶液加工方式大面积制造, 其中全打印制备电子器件技术具有灵活性高、适应性强、操作简单等特点而备受关注。随着打印技术的进步, 多种功能材料协同打印策略被用于制备有机半导体器件, 可以打破传统微型制造技术的机械和热传递方面的种种限制。本报告介绍了多材料、多尺度和多功能的 3D 打印技术结合人工智能 (AI) 制造技术, 从而实现了将 3D 仿生汗液传感器^[1]、光电传感器^[2]、和发光二极管^[3]等器件共形实时地制造到弯曲且移动的物体表面上, 为有机电子器件的制造提供了一种思路。

关键词: 增材制造; 多材料打印; 有机半导体; 光电传感器; 柔性电子

参考文献

- [1] Z. Zhu, S.-Z. Guo, T. Hirdler, C. Eide, X. Fan, J. Tolar, M. C. McAlpine, *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1707495.
- [2] S. H. Park, R. Su, J. Jeong, S.-Z. Guo, K. Qiu, D. Joung, F. Meng, M. C. McAlpine, *Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1803980.
- [3] R. Su, S. H. Park, X. Ouyang, S. I. Ahn, M. C. McAlpine, *Sci. Adv.* **2022**, *8*, eabl8798.

High-Performance n-Type Polymer Semiconductors for Organic Electronics

Xugang Guo (郭旭岗)*

Department of Materials Science and Engineering, Southern University of Science and Technology (SUSTech), No. 1088 Xueyuan Road, Xili, Nanshan, Shenzhen, Guangdong, 518055

*Email: guoxg@sustech.edu.cn

We present here a series of imide-functionalized ladder-type bithiophene imide derivatives with up to five imide groups. The homopolymers show widely tunable frontier molecular orbitals (FMOs) and film morphology. Novel imide-functionalized thiazoles with compact geometry were also developed, enabling the access of structurally novel acceptor-acceptor type polymers with both low-lying highest occupied molecular orbitals (HOMOs) and lowest unoccupied molecular orbitals (LUMO), which lead to unipolar n-type transport character in organic field-effect transistors (OFETs) with high electron mobilities, small off-currents, and large on-current/off-current ratios. Additionally, the strong electron-withdrawing cyano groups were also incorporated into π -conjugated (hetero)arenes, affording a series of highly electron-deficient building blocks with optimized physicochemical properties. n-Type polymers built from these novel imide- and cyano-functionalized building blocks show very promising device performance in OFETs, organic electrochemical transistors (OECTs) and organic thermoelectrics (OTEs). Finally, we will discuss our progress on transition metal catalyzed n-type molecular doping technique.

Keywords: imide-functionalized polymer semiconductors, n-type polymer semiconductors, n-doping, organic electronics

Reference

- [1] Feng, K.; Guo, H.; Sun, H.; Guo, X. *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*, 3804-3817.
- [2] Guo, H.; Yang, C. -Y.; Zhang, X.; Motta, A.; Feng, K.; Xia, Y.; Shi, Y.; Wu, Z.; Yang, K.; Chen, J.; Liao, Q.; Tang, Y.; Sun, H.; Woo, H. Y.; Fabiano, S.; Facchetti, A.; Guo, X. *Nature* **2021**, *599*, 67-73.

本征柔性材料与光电器件研究

郭云龙^{1*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn

光电子器件从硬质到柔性的形态, 拓展了其应用的空间和领域。有机电子器件如: 有机场效应晶体管 (OFET)、有机发光二极管 (OLED) 和有机光伏等作为柔性、低成本、可穿戴电子的理想先选择之一, 从材料到器件方面取得了巨大的进步。尤其是基于聚合物半导体材料的皮肤电子器件, 依然成为了这一领域研究的最前沿。近年来, 我们高迁移率聚合物半导体材料开发出发, 获得了p型迁移率超过 $10\text{cm}^2/\text{Vs}$ 以及p/n迁移率都超过 $6\text{cm}^2/\text{Vs}$ 的双极性的材料体系^[1]。在此基础上, 在本征柔性的皮肤电子器件方面, 我们通过设计蠕虫状组装的钙钛矿量子点, 构筑本征拉伸聚合物半导体异质薄膜, 获得了高光敏感度和耐极端机械变形性的本征可拉伸光晶体管^[3]。通常, 传统发光聚合物的可拉伸性的改善伴随着电荷传输能力的降低, 从而导致器件效率的显著降低。我们开发了一种基于高分子量苯撑乙烯和聚丙烯腈聚合物的自组装三维穿透纳米网络, 以同时提高拉伸性和载流子迁移率。实现了高电流效率的本征拉伸PLED^[4]。进一步利用取向的纳米限域结构聚合物半导体与弹性体材料, 实现了高灵敏度的可拉伸柔性X-ray探测器件^[5]以及低能耗的眼电柔性探测。^[6]本征柔性光电子器件的研究为复杂形态的全方位探测、运动状态下的健康监控以及新型三维显示技术的开发等都提供了新的研究思路。

关键词: 本征柔性; 聚合物半导体; 光电器件

参考文献

1. Jie Yang#, Yaqian Jiang#, Zhiyuan Zhao#, Xueli Yang#, Zheyue Zhang, Jinyang Chen, Junyu Li, Wei Shi, Shuai Wang, Yunlong Guo* and Yunqi Liu*, *Natl. Sci. Rev.* **2022**, 9(4), nwab145.
2. Kai Liu, Yangshuang Bian, Junhua Kuang, Xin Huang, Yi Li, Wei Shi, Zhiheng Zhu, Guocai Liu, Mingcong Qin, Zhiyuan Zhao, Xifeng Li, Yunlong Guo*, and Yunqi Liu, *Adv. Mater.* **2022**, 34(4), 2107304.
3. Yanwei Liu, Mingliang Zhu, Jianzhe Sun, Wenkang Shi, Zhiyuan Zhao, Xiaofang Wei, Xin Huang, Yunlong Guo*, Yunqi Liu*, *Adv. Mater.* **2022**, 34(27), 2201844.
4. Yangshuang Bian#, Kai Liu#, Yang Ran, Yi Li, Yuanhong Gao, Zhiyuan Zhao, Mingchao Shao, Yanwei Liu, Junhua Kuang, Zhiheng Zhu, Mingcong Qin, Zhichao Pan, Mingliang Zhu, Chenyu Wang, Hu Chen, Jia Li, Xifeng Li, Yunqi Liu and Yunlong Guo*, *Nat. Commun.* **2022**, 13, 7163.
5. Kai Liu#, Chengyu Wang#, Bowen Liu, Yangshuang Bian, Junhua Kuang, Yangkun Hou, Zhichao Pan, Guocai Liu, Xin Huang, Zhiheng Zhu, Mingcong Qin, Zhiyuan Zhao, Chen Jiang*, Yunqi Liu, and Yunlong Guo*, *Adv. Mater.* **2023**, **35**(5), 2207006.

有机光伏受体材料分子堆积与电子传输的理论模拟

韩广超^{1,*}, 易院平¹

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: gchaohan@iccas.ac.cn

增加活性层厚度同时保持高填充因子对进一步提高非富勒烯有机光伏的光电流和能量转换效率至关重要。这就要求给、受体材料同时具备较高的载流子迁移率。然而, 非富勒烯受体材料的电子迁移率往往远小于 $10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。通过多尺度理论模拟我们对两类典型非富勒受体材料的电子传输机制进行了系统研究。对于A-D-A小分子受体, 我们发现端基 π - π 堆积提供主要传输通道。因此, 提出调控端基和侧链增强端基 π - π 相互作用是进一步提高迁移率的有效策略。¹⁻³对于寡聚/聚合的萘二酰亚胺受体, 我们指出同时增强分子内和分子间的电子耦合才能获得高电子迁移率。⁴⁻⁶此外, 我们强调对上述两类材料有效的设计策略适用于寡聚/聚合的A-D-A小分子受体。

关键词: 非富勒烯受体; 分子堆积; 电子传输; 多尺度模拟

参考文献

- [1] Han, G.; Guo, Y.; Song, X.; Wang, Y.; Yi, Y.* *J. Mater. Chem. C* **2017**, *5*: 4852.
- [2] Han, G.; Guo, Y.; Ning, L.; Yi, Y.* *Sol. RRL* **2019**, *3*: 1800251.
- [3] Zheng, W.; Liu, J.; Guo, Y.; Han, G.*; Yi, Y.* *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *32*: 2108551.
- [4] Guo, Y.; Han, G.; Duan, R.; Geng, H.; Yi, Y.* *J. Mater. Chem. A* **2018**, *6*: 14224.
- [5] Guo, Y.; Han, G.; Tu, Z.; Yi, Y. *J. Mater. Chem. A* **2019**, *7*: 12532.
- [6] Ning, L.; Han, G.*; Yi, Y.* *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*: 16527.

Control over Solution Phase Structure and Thin Film Morphology for High Performance Conjugated Polymers

Hongxiang Li¹, Sichun Wang¹, Kefeng Zhao¹, Yanchun Han (韩艳春)^{1,*}

¹ State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Changchun Institute of Applied Chemistry, Chinese Academy of Sciences, 5625 Renmin Street, Changchun 130022, P. R. China

E-mail: ychan@ciac.ac.cn

Conjugated polymers have attracted much attention for their (opto)electronic and biomedical applications. The solid-state properties of conjugated polymers depend sensitively on their morphologies across all length scales. This multiscale morphology in the solid state is largely affected by solution-state aggregates and their assembly pathways from solution to thin films. In this talk, I will address two issues, 1) how to control the precise solution-aggregate structures by changing the strength of attractive interactions between segments and 2) how the solid-state morphology and electronic and mechanical properties can be determined by solution-phase structure and assembly pathways in a controllable fashion.

Keywords: Conjugated polymers, multiscale morphology, solution-state aggregates, assembly pathways

References

- [1] Zicheng Ding, Dongle Liu, Kui Zhao, and Yanchun Han. *Macromolecules*, 2021, 54, 3907.
- [2] Kefeng Zhao, Qiang Zhang, Liang Chen, Tao Zhang, and Yanchun Han. *Macromolecules*, 2021, 54(21), 10203-10215.
- [3] Hongxiang Li, Hua Yang, Lu Zhang, Sichun Wang, Yu Chen, Qiang Zhang, Jidong Zhang, Hongkun Tian, and Yanchun Han. *Macromolecules*, 2021, 54(22), 10557-10573.
- [4] Kefeng Zhao, Tao Zhang, Lu Zhang, Junhang Li, Hongxiang Li, Fan Wu, Yu Chen, Qiang Zhang, and Yanchun Han. *Macromolecules*, 2021, 54(5): 2143-2154.
- [5] Sichun Wang, Hongxiang Li, Kefeng Zhao, Lu Zhang, Qiang Zhang, Xinhong Yu, Hongkun Tian, and Yanchun Han. *Macromolecules*, 2022, 55 (7), 2497–2508.
- [6] Yin Wu, Zicheng Ding, Qiang Zhang, Xiao Liang, Hua Yang, Wenliang Huang, Yueling Su, Yi Zhang, Hanlin Hu, Yanchun Han, Shengzhong Frank Liu, and Kui Zhao. *Macromolecules*, 2022, 55, 19, 8609–8618.
- [7] Dongle Liu, Zicheng Ding, Yin Wu, Shengzhong (Frank) Liu, Yanchun Han, Kui Zhao. *Macromolecules* 2022, 55, 297–308.

二维有机材料与器件

何道伟^{1,*}, 王欣然¹

¹ 南京大学, 江苏省南京市栖霞区仙林大道 163 号, 210023

*Email: hedwei@nju.edu.cn

在过去几十年里, 通过设计高迁移率分子材料和理解电荷传输机制, 有机器件的性能取得了巨大进展。尽管如此, 有机器件中金属-半导体接触仍需要进一步解决。目前, OFETs器件报道的最低接触电阻达到几十 $\Omega \cdot \text{cm}$, 比基于氧化物半导体和二维层状原子晶体高出至少两个数量级, 其原因可归结为以下两点: (i)分子与金属间的范德华间隙导致界面处电子态去耦合, 降低载流子注入效率; (ii)传统的沉积过程涉及高能金属离子轰击有机薄膜, 导致高密度的化学缺陷和结构紊乱, 形成费米能级钉扎效应, 无法降低接触势垒。要进一步降低OFETs器件接触电阻, 这两个问题需要同时解决。在此, 我们深入优化金属与有机半导体材料的接触界面, 实现了小分子OFETs器件的超低接触电阻(可达 $7.0 \Omega \cdot \text{cm}$)传输长度($0.9 \mu \text{m}$)。此外, 我们的器件具有最先进的性能, 包括 $18 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的空穴迁移率、 $12.1 \mu \text{A} / \mu \text{m}$ 的饱和电流、 60 mV/dec 的亚阈值摆幅和 0.36 GHz 的工作频率。利用该接触技术, 我们制备出大面积OFET阵列, 实现100%的良率和优异的性能均一性。

关键词: 二维有机晶体; 接触电阻; 电路密度; 频率

参考文献

- [1] Daowei He, Xinran Wang* et al., Two-dimensional quasi-freestanding molecular crystals for high-performance organic field-effect transistors, *Nature Communications* 5, 5162 (2014).
- [2] Daowei He, Xinran Wang* et al., Ultrahigh mobility and efficient charge injection in monolayer organic thin-film transistors on boron nitride, *Science Advances*, 3, e1701186 (2017).
- [3] Daowei He, Xinran Wang,* Xiangfeng Duan* et al., High-Performance Black Phosphorus Field-Effect Transistors with Long-Term Air Stability, *Nano Letters*, 19, 331(2019).
- [4] Junpeng Zeng, Daowei He,* Xinran Wang* et al., Ultralow contact resistance in organic transistors via orbital hybridization, *Nature Communications* 14, 324 (2023).

基于非共价相互作用的功能有机共轭材料体系

何凤*

南方科技大学，深圳市南山区学苑大道 1088 号，518055

*Email: hef@sustech.edu.cn

有机聚合物功能材料的性能是由其链结构以及链内与链间的相互作用共同决定，众多高性能有机聚合物材料往往都具有协同的分子间弱相互作用，其对材料的优良特性起着至关重要的作用。我们基于精确调控分子弱相互作用进而优化材料结构形貌和性能的基本研究理念，分别通过端基氯原子的 $\text{Cl}\cdots\text{S}$ 、 $\text{Cl}\cdots\pi$ 等分子间相互作用调控有机光电材料分子的排列聚集方式，构筑了系列具有特定传输结构的受体体系。特别是在具有特定氯取代的非富勒烯受体中发现了三维网络结构，这种聚集态结构为分子间电子跳跃传输提供更多的结点和通道，从而增大激子扩散距离以及有效提高电子迁移率，是提升有机受体材料性能的决定性聚集态结构。我们还系统研究了氯取代位置、数量、异构性等对三维网络结构形成的影响，给出了实现三维网络结构的分子设计方法。实验测定氯取代有机受体中三维网络聚集态的激子扩散距离可超越 40 nm，为发展准平面异质结（Q-PHJ）器件提供了合适的材料体系，相比本体异质结（BHJ）器件，准平面异质结具有热力学更稳定的给受体双层相区结构，实现了高效率下器件稳定性的大幅提高。

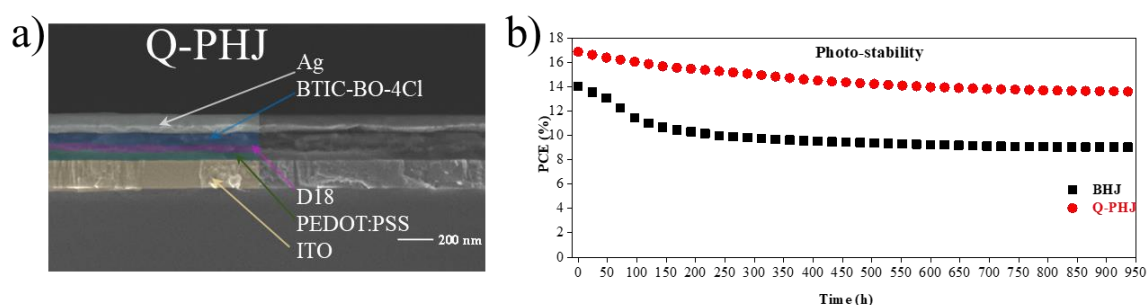


Fig. 1 a) SEM image of Q-PHJ device, b) the photo-stability of BHJ and Q-PHJ devices.

关键词： 分子间相互作用；氯取代；三维网络结构，准平面异质结，稳定性

参考文献

- [1] Chen, H.[‡]; Hu, Z.M.[‡]; Wang, H.; Liu, L.Z.; Chao, P.J.; Qu, J.F.; Liu, A.H.; Chen, W.; He, F.* *Joule* **2018**, *2*: 1623–1634.
- [2] Lai, H.J.[‡]; Zhao, Q.Q.[‡]; Chen, Z.Y.[‡]; Chen, H.[‡]; Chao, P.J.; Zhu, Y.L.; Lang, Y.W.; Zhen, N.; Mo, D.Z.; Zhang, Y.Z.; He, F.* *Joule* **2020**, *4*: 688-700.
- [3] Chen, H.[‡]; Zhao, T.X.[‡]; Li, L.; Tan, P.; Lai, H.J.; Zhu, Y.L.; Lai, X.; Han, L.; Zhen, N.; Guo, L.; He, F.* *Adv. Mater.* **2021**, 2102778.

功能分子配位在钙钛矿光伏电池中的应用

何祝兵^{1,2*}

¹南方科技大学材料科学与工程系，创新材料研究院（I2M），广东省深圳市南山区学苑大道1088号，518055

²深圳市全光谱发电功能材料重点实验室，广东省深圳市南山区学苑大道1088号，518055

*Email: hezb@sustech.edu.cn

叠层器件顶底子电池之间的界面载流子复合层（常称“隧穿结”）非常关键。其要求纵向导电率高，复合顺畅，但要求横向导电率低，纯无机材料很难满足而成为叠层器件重要的科学问题之一。报告人团队在钙钛矿半透明电池上大量透明背电极的摸索工作中，在BCP上蒸镀1 nm薄银，对器件填充因子的显著提升并突破80%的发现，促使我们进一步研究发现，Ag能够渗透进BCP层，并贯穿BCP层形成BCP:Ag配位体。通过一系列光谱表征发现，BCP:Ag络合物能够在BCP禁带中形成很多能级，正是这些能级促进了电子传输，从而提高了器件填充因子（*J. Mater. Chem. A* 2021, 9, 12009）。只要控制Ag的蒸镀量，我们就可以控制BCP:Ag络合物在绝缘BCP层分布密度，从而形成了绝佳的“纵向导电且横向不导电”的BCP:Ag杂化复合层。于是，我们将BCP:Ag/IZO的组合为应用到钙钛矿/有机（*Nat. Energy* 2022, 7, 229,）和钙钛矿/晶硅叠层电池（*Sol. RRL* 2022, 6, 2200793）结构中，获得了创纪录的钙钛矿/有机叠层电池和高效钙钛矿/晶体硅叠层电池等出色的器件光电性能。这种杂化材料组合为叠层电池提供了可选解决方案。

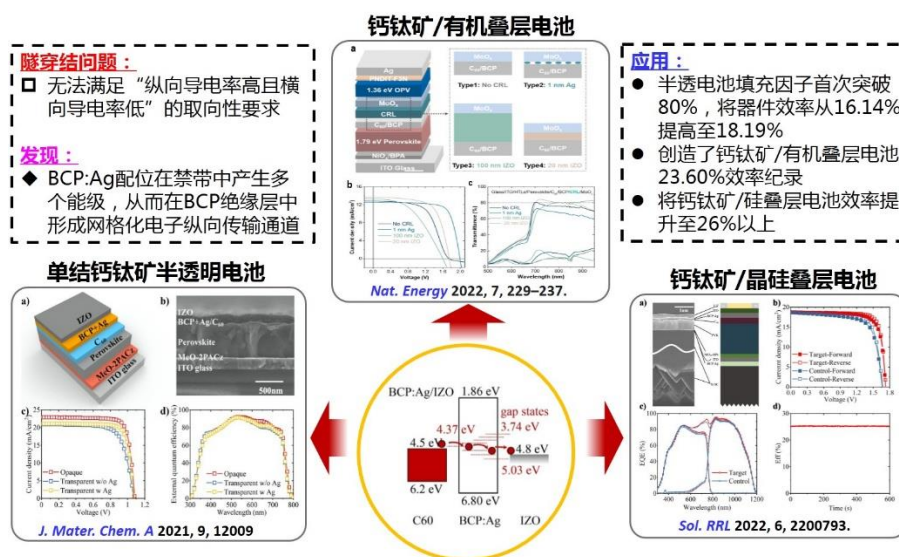


图1 BCP:Ag配位体构建的多能级通道及其在叠层电池中的应用

关键词：叠层电池；隧穿结；BCP:Ag配位体。

光控主动适应型有机晶体管的构筑及性能研究

贺紫晗^{1,2}, 叶德楷², 狄重安^{1,*}, 朱道本¹中国科学院化学研究所有机固体院重点实验室, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190²中国科学院大学化学学院, 北京市怀柔区怀北庄380号, 101408*Email: dicha@iccas.ac.cn

光控主动适应在生物体视觉感知中扮演着重要角色, 通过主动适应可以调节自身视觉灵敏度以应对外界环境变化^[1]。受生物体启发, 光控适应型器件的要求是在单一元器件中同时实现光控的瞬时响应、持续信号刺激下的动态可控衰减、以及稳定循环工作^[2]。我们将两个功能互补的本体异质结引入光响应电荷传输层和复合绝缘层, 制备了模拟视觉适应功能的光控适应型有机晶体管(OAAT)^[3]。通过光伏效应和复合绝缘层内电荷俘获效应的耦合, 成功实现了光控载流子浓度的可控调节。该器件可以根据外界的光强变化在超慢适应($\tau > 100$ s)、慢适应(1 s $< \tau < 100$ s)与快适应($\tau < 1$ s)三种行为特性之间进行可逆切换, 实现了光控的适应功能调节。更为重要的是, 该器件可以进一步模拟视觉系统中明暗适应等多种功能行为, 表明其可以有效地实时处理复杂的光电信号, 为新一代仿生视觉感知系统提供了一种新思路。

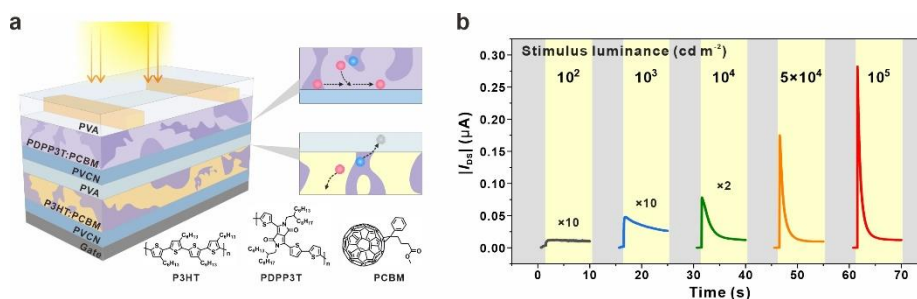


Fig. 1 (a) Schematic of an OAAT with two complementary bulk-heterojunctions. (b) Real-time photoresponse of an OAAT to various stimuli luminance on a dark background.

关键词: 有机场效应晶体管; 光控主动适应器件; 智能感知器件

参考文献

- [1] Mante, V.; Frazor, R.; Bonin, V. *et al*, *Nat. Neurosci.* **2005**, **8**: 1690.
 [2] Shen, H.; He, Z.; Di, C.-A. *et al*, *Adv. Mater.* **2019**, **31**: 1905018.
 [3] He, Z.; Shen, H.; Ye, D.; Di, C.-A. *et al*, *Nat. Electron.* **2021**, **4**: 522.

有机光伏材料与器件近期进展

侯剑辉*

¹ 中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

² 中国科学院大学, 北京市怀柔区雁栖湖东路1号 邮编: 101408

*Email: hjhzl@iccas.ac.cn

近年来, 有机太阳能电池的光伏效率得到逐步的提升, 目前单结和叠层器件的效率已经分别达到19%和20%以上。有机太阳能电池的光电活性层由电子给体与受体材料构成, 光伏材料的分子结构设计是领域发展的源动力之一。聚合物电子给体的化学结构经历了长期的演变和优化, 在领域发展的每一个阶段, 各类聚合物电子给体为领域发展提供了关键支撑。聚合物光伏材料设计中, 分子能级与吸收光谱调控相对成熟, 聚集态结构调控积累了大量规律性结论, 但是对于非辐射能量损耗调控、与受体之间的相分离程度调控、进一步提升迁移率等问题, 仍然欠缺有效的方法。当前, 有机光伏电池不仅面临“跨越式提升光伏效率和稳定性”的重要挑战, 而且面临与其它类型光伏电池的激烈竞争, 发展新型聚合物电子给体材料仍然是未来工作的重要突破点。本报告将在简要对聚合物电子给体材料面临的问题进行分析, 介绍我课题组近期在聚合物光伏材料、有机电子受体及光伏器件方面取得的进展, 以期为同行提供一定的借鉴。

关键词: 有机光伏电池; 光伏效率; 有机光伏材料; 分子设计; 器件构筑。

参考文献

[1] T. Zhang, C. An, Y. Cui, J. Zhang, P. Bi, C. Yang, S. Zhang, J. Hou, *Adv. Mater.* **2022**, *34*, 2105803.

[2] Z. Zheng, J. Wang, P. Bi, J. Ren, Y. Wang, Y. Yang, X. Liu, S. Zhang, J. Hou, *Joule*, **2022**, *6*, 171-184.

分子调控与高效稳定的全无机钙钛矿电池

胡劲松*

中国科学院化学研究所, 北京 100190

*Email: hujs@iccas.ac.cn

与杂化钙钛矿材料相比, 全无机钙钛矿材料 CsPbX_3 具有更加优异的光热稳定性而备受关注, 但其光伏器件的转换效率仍远低于前者, 研究其内在机制与提升器件效率的策略对于无机钙钛矿光伏器件研究具有重要意义。本报告将介绍我们在 CsPbI_3 与 CsPbI_2Br 的相变与稳定性方面开展的系列研究, 探讨极性分子诱导的相转变机制与构建稳定光伏相无机钙钛矿的策略。结合实验和理论研究, 探讨氧对无机钙钛矿的钝化机制。为了解决无机钙钛矿器件湿气诱导的不稳定问题, 报告将着重讨论使用无吸湿性添加剂的聚噻吩类空穴传输层, 结合功能小分子缺陷钝化与传输层分子取向调控来构建高效率无机钙钛矿电池器件, 介绍系列调控钙钛矿薄膜生长与界面分子调控方法, 进而将基于无掺杂P3HT空穴传输层的 CsPbI_2Br 电池效率提高到17%以上, 以及将 CsPbI_3 电池效率提高到20%以上。这些电池器件表现出优异的光热稳定性。

关键词: 全无机钙钛矿; 太阳能电池; 稳定性; 分子钝化; 分子调控

参考文献

- [1] J.-K. Sun, S. Huang, X.-Z. Liu, Q. Xu, Q.-H. Zhang, W.-J. Jiang, D.-J. Xue, J.-C. Xu, J.-Y. Ma, J. Ding, Q.-Q. Ge, L. Gu, X.-H. Fang, H.-Z. Zhong, J.-S. Hu, L.-J. Wan, *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 11705-11715.
- [2] B. Zhao, S.-F. Jin, S. Huang, N. Liu, J.-Y. Ma, D.-J. Xue, Q. Han, J. Ding, Q.-Q. Ge, Y. Feng, J.-S. Hu, *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140, 11716-11725.
- [3] S.-C. Liu, Z. Li, Y. Yang, X. Wang, Y.-X. Chen, D.-J. Xue, J.-S. Hu, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 18075-18082.
- [4] M.-H. Li, S.-C. Liu, F.-Z. Qiu, Z.-Y. Zhang, D.-J. Xue, J.-S. Hu, *Adv. Energy Mater.* 2020, 10, 2000501.
- [5] M.-H. Li, J.-Y. Shao, Y. Jiang, F.-Z. Qiu, S. Wang, J. Zhang, G. Han, J. Tang, F. Wang, Z. Wei, Y. Yi, Y.W. Zhong, J.-S. Hu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 16388-16393.
- [6] M.-H. Li, F.-Z. Qiu, S. Wang, Y. Jiang, J.-S. Hu, *Mater. Today* 2022, 52, 250-268.
- [7] J. Wu, M.-H. Li, J.-T. Fan, Z. Li, X.-H. Fan, D.-J. Xue, J.-S. Hu, *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 5872-5879

基于机器人安全控制的电子皮肤器件阵列

胡平安、张甲、王帅

哈尔滨工业大学材料科学与工程学院，

E-mail: hupa@hit.edu.cn

电子皮肤器件在智能装备、机器人的智能触觉感知等方面具有广泛应用潜力。利用石墨烯、二维范德华半导体优异的机械与电学性能，开展敏感结构材料与智能感知的电子皮肤器件研究，具体成果有：优化金属电极接触，发现了介电衬底表面存在的载流子散射及库伦散射严重影响其上支持的超薄二维敏感半导体电学性能；设计与制备出大线性范围响应的功能敏感结构，并进一步开展膜材料集成与柔性器件批量加工技术，研制出接近觉与力触觉功能一体的高灵敏电子皮肤器件；最后，实现了其在机器人安全控制中的应用(Fig 1)。

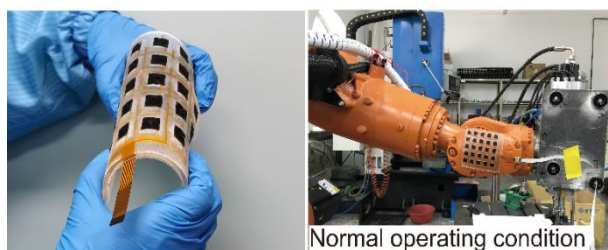


Fig. 1 Electronic skin with Robot

关键词：电子皮肤；智能感知； 机器人

参考文献

- [1] S Wang, F Gao, Y Hu, S Zhang, H Shang, C Ge, B Tan, X Zhang, J Zhang, P, Hu, *Chem Eng. J.*, 2022, 443, 136446
- [2] J Zhang, PA Hu, et al, *Adv Mater*, 2020, 32, 202000769
- [3] MJ Dai, PA Hu, et al, *Nanoletter* 2020, 20, 201-207
- [4] MJ Dai, Hu, PA et al *Nano Lett.* 2019, 19, 5410-5416
- [5] J Zhang, PA Hu, et al *Nanoscale* 2018, 10, 7387-7395
- [6] W Feng, P A Hu*, et al *Chem Mater* 2016, 28, 4278-4283
- [7] W Feng, PA Hu*, et al *Adv Mater* 2014, 26(38), 6587-6593

印刷制备柔性可穿戴光伏器件

胡笑添^{1,*}

¹ 南昌大学化学化工学院，南昌市学府大道 999 号，330031

*Email: happyhu@ncu.edu.cn

有机太阳能电池在柔性可穿戴电子设备和节能建筑一体化方面具有独特的优势和巨大的应用潜力，然而，其本身的相不稳定性、结晶性等问题以及柔性透明电极材料的选择限制了柔性有机太阳能电池的进一步发展和商业化应用拓展。我们通过以柔性印刷工艺为支撑，以柔性仿生设计为创新点，围绕柔性太阳能电池集成设计与大面积印刷工艺开展研究：通过墨水协同分散和剪切冲量调控的方法，实现了多种光电功能材料的形貌一致性印刷；开发了基于新原理、新概念，具有自主知识产权的高精度光电器件印刷系统，并实现大面积柔性透明电极和光伏模组的印刷制备。

关键词：柔性太阳能电池；相调控；绿色印刷；可穿戴电子

参考文献

- [1] Liu, S.; Li, H.; Wu, X.; Chen, D.; Zhang, L.*; Meng, X.; Tan, L.; Hu, X.*; Chen, Y.*, *Adv. Mater.*, 2022, 23(34): 2201604.
- [2] Li, H.; Liu, S.; Wu, X.; Qi, Q.; Zhang, H.; Meng, X.; Hu, X.*; Ye, L.*; Chen, Y.*, *Energ. Environ. Sci.*, 2022, 15(5): 2130-2138.

有机半导体掺杂研究

胡袁源^{1,*}

¹ 湖南大学半导体学院（集成电路学院），长沙，410082

*Email: yhu@hnu.edu.cn

掺杂是调控半导体电学性质的常用手段。无机半导体硅的工业化应用建立在对硅高效可控掺杂的基础上。相比而言，有机半导体掺杂仍是有待解决的科学与工程问题。如何实现对有机半导体的高效PN掺杂？如何利用高效掺杂实现对有机半导体电学性质的调控以及器件性能的提升？如何利用掺杂技术实现新型器件的构建？上述问题一直是本领域力求解决的问题。在本次报告中，我们将汇报近期在有机半导体器件掺杂方面的研究进展，包括有机半导体掺杂机制与物理研究^{1,2}、新型掺杂剂研发^{3,4,5}及掺杂技术在有机半导体器件中的应用^{6,7,8,9}等。

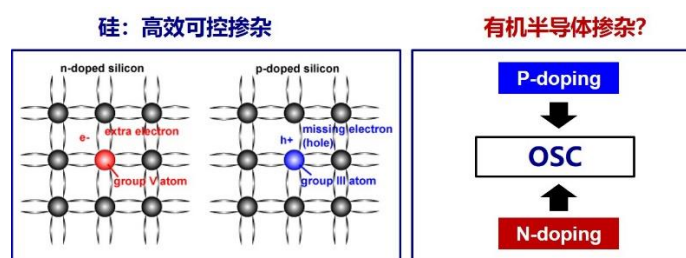


Fig. 1 有机半导体掺杂

关键词：掺杂机制；掺杂效率；场效应晶体管；极性调控

参考文献

- [1] H. Wei, Z. Cheng, T. Wu, Y. Liu, J. Guo, P. Chen, J. Xia, H. Xie, X. Qiu, T. Liu, B. Zhang, J. Hui, Z. Zeng*, Y. Bai*, Y. Hu*, *Advanced Materials*, 202300084 (2023).
- [2] J. Guo, Y. Liu, P. Chen, X. Wang, Y. Wang, J. Guo, X. Qiu, Z. Zeng, L. Jiang, Y. Yi, S. Watanabe, L. Liao, Y. Bai*, T.-Q. Nguyen*, Y. Hu*, *Advanced Science*, 2203111 (2022).
- [3] D. Lu, F. Huang, C. Gao, J. Yang, J. Guo, Y. Hu*, Q. Bao, Y.-Y. Noh*, J. Chu, and W. Li*, *Adv Funct Mater*, 2111285 (2022).
- [4] H. Wei, P. Chen, J. Guo, Y. Liu, X. Qiu, H. Chen, Z. Zeng, T.-Q. Nguyen*, Y. Hu*, *Adv Funct Mater*, 2102768 (2021).
- [5] Y. Hu, Z. Rengert, C. McDowell, M. Ford, M. Wang, A. Karki, A. Lill, G. Bazan, and T.-Q. Nguyen, *ACS Nano*, 3938 (2018).
- [6] P. Chen, J. Guo, X. Yan, Y. Liu, H. Wei, X. Qiu, J. Xia, J. Guo, J. Ding, Z. Gong, C. Chen, T. Lei, H. Chen*, Z. Zeng*, Y. Hu*, *Small*, 202207858 (2023).
- [7] Y. Chen, L. Zhao, P. Chen, Y. Li, J. Guo, Y. Liu, X. Qiu, J. Xia, K. Chen, H. Chen, X. Lu, L. Jiang, L. Liao, T.-Q. Nguyen*, Y. Hu*, *Matter*, 2882 (2022).
- [8] X. Qiu, J. Guo, P. Chen, K. Chen, Y. Liu, C. Ma, H. Chen, Y. Hu*, *Small*, 2101325 (2021).
- [9] J. Guo, G. Li*, H. Reith, L. Jiang, M. Wang, Y. Li, X. Wang, Z. Zeng, H. Zhao, X. Lu, G. Schierning, K. Nielsch, L. Liao, Y. Hu*, *Advanced Electronic Materials*, 201900945 (2020).

具备超高导电率的可溶液加工 n 型导电聚合物的制备

黄飞^{1,*}

¹发光材料与器件国家重点实验室, 华南理工大学, 广州, 510641

*msfhuang@scut.edu.cn

自上世纪70年代以来, 导电聚乙炔的发现使得“合成金属”成为高分子科学的新兴领域。然而, 聚乙炔不溶不熔, 难以加工成为实用材料。曹镛等人于1992年提出“对阴离子诱导加工”的方法, 实现导电聚苯胺的溶液加工^[1]。之后一系列可溶液加工的导电聚合物被发展出来, 并得到广泛应用。然而, 目前大部分导电聚合物为p型材料, 有机n型高导材料一直受限。为了实现导电聚合物的溶解, 通常需要在侧链引入极性基团。我们通过主链设计以及引入极性侧链(如季铵盐等), 实现多种水/醇溶n型材料的制备, 并在有机光电器件中取得广泛应用^[2]。此外, 侧链极性基团还能实现对主链的n型自掺杂, 从而提升电子传输性能^[3]。最近, 我们提出了一种新的导电聚合物构筑策略, 将氧化聚合与还原掺杂相结合, 实现多种具备高电导率的n型导电聚合物的制备^[4,5], 其与溶液具有相互作用, 无需表面活性剂以及烷基侧链即可实现溶液加工, 有望为柔性印刷透明电极的制备以及有机电子器件提供新的机遇。

关键词: 导电聚合物; n型掺杂; 溶液加工; 有机电子器件

参考文献

- [1] Cao, Y.; Smith, P.; Heeger A. J. *Synth. Met.* **1992**, **48**: 901.
- [2] Duan, C.; Zhang, K.; Zhong, C.; Huang, F.; Cao, Y. *Chem. Soc. Rev.* **2013**, **42**: 9071.
- [3] Wu, Z.; Sun, C.; Dong, S.; Jiang, X.; Wu, S.; Wu, H.; Yip, H.-L.; Huang, F.; Cao, Y.; *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, **138**: 2004.
- [4] Tang, H.; Liang, Y.; Liu, C.; Hu, Z.; Deng, Y.; Guo, H.; Yu, Z.; Song, A.; Zhao, H.; Zhao, D.; Zhang, Y.; Guo, X.; Pei, J.; Ma, Y.; Cao, Y.; Huang, F. *Nature* **2022**, **611**, 271.
- [5] Tang, H.; Cai, H.; Zhao, H.; Liu, Z.; Tan, R.; Huang, F. *CCS Chemistry* **2023**, 10.31635/ccschem.023.202202363.

层状正极材料的界面结构设计 with 高电压特性研究

黄富强¹, 蔡明志¹

¹ 北京大学化学与分子工程学院, 北京市, 100091

*Email: huangfq@pku.edu.cn

随着长续航储能器件对能量密度日益升高的要求, 开发兼具高电压、高容量的正极材料迫在眉睫。然而, 以LiCoO₂为代表的层状氧化物正极材料在高电压下面临晶格氧析出等多种界面问题, 通常的体相掺杂、表面包覆手段难以起到显著改善效果^[1]。本报告中利用三维钙钛矿结构的高稳定性, 在层状正极表面通过原位反应构建出高均匀性、准外延的原子级钙钛矿结构, 抑制高电压下的晶格氧析出, 提高电化学性能。在钴酸锂正极中利用液相离子交换反应, 构建出具有压缩应变的镧基钙钛矿La_wCa_{1-w}CoO_{3-δ}结构^[2]; 富锂锰基正极中利用有机络合物的协同作用, 在晶界中构建出钡基钙钛矿BaMnO_{3-δ}结构; 三元高镍正极中利用溶剂热反应, 在表面构建出层状钙钛矿La₄LiNiO₈结构。三种钙钛矿结构在高电压下均保持高度的稳定性, 其中的氧空位可作为高电压下氧的可逆缓冲层, 抑制晶格氧从表面的析出, 显著提高材料的循环性能。该策略作为一种崭新的界面结构设计思路, 将对未来的电极材料界面工程起到一定的指导作用。

关键词: 高电压; 正极材料; 钙钛矿结构; 晶格氧析出

参考文献

- [1] Kraytsberg, A., Ein - Eli, Y. Higher, stronger, better... a review of 5 Volt cathode materials for advanced lithium-ion batteries. *Adv. Energy Mater.* **2012**, 2, 922–939.
- [2] Cai, M., Dong, Y., Xie, M. et al. Stalling oxygen evolution in high-voltage cathodes by lanthanization. *Nat. Energy* **2023**, 8, 159–168.

无铅锡基卤化物钙钛矿的结晶动力学调控研究

黄俊杰¹, 王军方¹, 刘天华¹, 孟祥悦^{1*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

卤化锡钙钛矿是无铅钙钛矿太阳能电池 (PSC) 的有前途的候选者, 这不仅是因为其低毒性, 还因为其理想的能带隙、高电荷载流子迁移率和长的载流子寿命。卤化锡PSC的认证效率现已达到14%以上, 但与理论效率相差甚远。这主要是由于缺乏对卤化锡钙钛矿薄膜的晶体成核和生长机制的深入了解, 导致其薄膜质量较差。因此我们从卤化锡钙钛矿的结晶动力学角度出发, 通过控制锡基钙钛矿晶体快成核和满生长的过程, 制备了高质量的锡基钙钛矿薄膜。促进了高效、高稳定性的生态友好型锡基PSCs的发展。

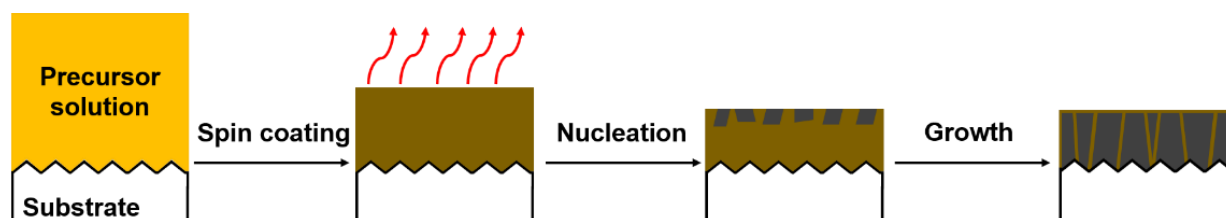


Fig. 1 Schematic illustration of nucleation and growth process of Sn-based perovskite crystals.

关键词: 无铅; 结晶动力学; 锡; 成核; 晶体生长

参考文献

- [1] Wang, J.; Gao, Z.; Yang, J.; Lv, M.; Chen, H.; Xue, D-J.; Meng, X.*; Yang, S.* *Adv. Energy Mater.* **2021**, **11**: 2102131.
- [2] Wang, J.; Yang, C.; Chen, H.; Lv, M.; Liu, T.; Chen, H.; Xue, D-J.; Hu, J-S.; Han, L.*; Yang, S.*; Meng, X.* *ACS Energy Lett.* **2023**, **8**: 1590-1596.

表界面调控构筑高性能有机传感器

黄丽珍¹, 迟力峰¹

¹苏州大学功能纳米与软物质研究院, 苏州工业园区仁爱路 199 号, 215123

*Email: lzhuang@suda.edu.cn

近年来随着柔性、轻质化、可穿戴智能电子器件的快速发展, 基于有机半导体的物理、化学、生物传感器, 由于化学结构可调、本征机械柔性而成为备受关注的前沿研究。半导体传感器的核心在于电学信号在分析物或者外来刺激影响下的变化灵敏度。这与有机半导体薄膜的微观结构、化学结构和电子结构密切相关。我们基于表界面科学原理, 从表界面角度发展了系列调控电输运水平、界面电子结构和微观结构的策略, 进而调制薄膜和外部信号关系, 开发了针对不同分析物和外来刺激的化学\物理\生物传感器。并系统理解界面结构-半导体薄膜性质-传感响应性能的关系, 为进一步开发高灵敏柔性可穿戴智能传感器提供了基础。

关键词: 有机半导体; 传感器; 晶体管; 界面掺杂

参考文献

- [1] Zi Wang#, Lizhen Huang#, Xiaofei Zhu, Xu Zhou, Lifeng Chi*, An Ultrasensitive Organic Semiconductor NO₂ Sensor Based on Crystalline TIPS-Pentacene Films, *Adv. Mater.* 29, 1703192(2017).
- [2] Lizhen Huang, Zhi Wang, Jianhua Chen, Binghao Wang, Yao Chen, Wei Huang,* Lifeng Chi,* Tobin J. Marks,* and Antonio Facchetti*, Porous Semiconducting Polymers Enable High - Performance Electrochemical Transistors, *Adv. Mater.* 33, 2007041 (2021).

具有神经形态的智能传感器

黄伟国^{1*}

¹中国科学院福建物质结构研究所, 福州, 350002

*Email: whuang@fjirsm.ac.cn

动物鼻子不仅可灵敏快速地检测出目标气体的浓度, 准确地识别气体的种类, 还能根据气体浓度在时间和空间的分布变化, 对气体源进行准确地定位。而现有的传感器大多都无法实现动物鼻子的功能, 尤其是在气体源定位方面鲜有报道。然而, 发展具有神经形态的传感器, 真正实现智能仿生的特性, 不仅具有重要的学术意义, 而且对生活生产及国家安全等领域都具有非常重要的应用价值。我们通过模拟骆驼鼻子的结构, 开发了一种神经形态湿度传感器。利用两性离子聚合物网络的多孔结构和吸湿特性的协同作用, 实现了优异的检测灵敏度和可分辨性。该传感器可以精确跟踪运动过程中人体皮肤的汗液分泌, 无需直接接触即可感知手指的位置和运动。更重要的是, 由于水分子和两性离子之间超高的结合能, 该传感器表现出典型的神经突触行为, 如双脉冲易化和学习/遗忘特性, 并具有水源定位的功能。该工作为其他高性能生化传感器和更具广泛应用前景的下一代智能传感器提供了全新的设计原则。

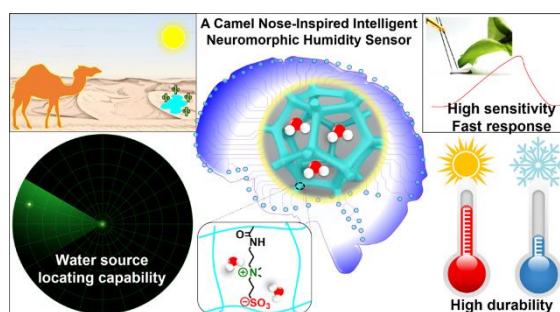


Fig. 1 A camel nose-inspired intelligent neuromorphic humidity sensor.

关键词: 神经形态传感器; 两性离子聚合物; 多孔网络; 高度灵敏; 信源定位功能

参考文献

[1] Li, C.; Liu, J.; Peng, H.; Sui, Y.; Song, J.; Liu, Y.; Huang, W.; Chen, X.; Shen, J.; Ling, Y.; Huang, C.; Hong, Y.; Huang, W. *ACS Nano*, **2022**, *16*, 1511-1522.

结晶性光伏材料聚集与形貌调控研究

霍利军*

北京航空航天大学, 海淀区学院路 37 号, 100191

*Email: huolijun@buaa.edu.cn

有机太阳能电池的光电转换效率 (PCE) 已达到 17~19%, 产业化潜力巨大。但从综合的光电转化效率来看, 制约效率进一步提高的主要原因在于光伏材料聚集态调控不精细、给受体相容性不足导致的。前期工作中, 我们通过采用主链、侧链和端基的一系列化学手段和策略来精细调控光伏材料纳米形貌, 实现了光伏材料聚集态降低、相容性增加, 有效提升了光伏性能, 同时降低了合成成本并实现了稳定性的初步改善。通过这样系统的从单分子到聚集态的综合优化, 我们实现了较高的光伏性能。同时, 我们将这种有效的策略应用到不同材料体系, 其器件结果都有较为普遍的提高。因此, 对结晶性光伏材料聚集行为的研究和改善思路在今后的高效率光伏分子设计中起到积极的借鉴作用。

关键词: 结晶性聚合物; 位阻效应; 光电转化效率; 有机太阳能电池

参考文献

- [1] Zheng, B.; Yue, Y.; Ni, J.; Sun, R.; Min, J.; Wang, J.; Jiang, L.; Huo, L. *Sci China Chem*, **2022**, 65, <https://doi.org/10.1007/s11426-021-1205-5>.
- [2] Yue, Y.; Zheng, B.; Yang, W.; Huo, L.; Wang, J.; Jiang, L. *Adv. Mater.* **2022**, 2108508.
- [3] Zheng B.; Qi, F.; Zhang, Y.; Zhang, M.; Gao, P.; Liu, F.; Li, T.; Wei, D.; Wan, M.; Chen, G.; Huo, L.; Jiang, L. *Adv. Energy Mater.* **2021**, 11, 2003954.
- [4] Xue. X.; Zheng, B.; Zhang, Y.; Zhang, M.; Wei, D.; Liu, F.; Wan, M.; Liu, J.; Chen, G.; Huo, L. *Adv. Energy Mater.* **2020**, 10, 2002142.
- [5] Xue. X.; Weng, K.; Qi, F.; Zhang, Y.; Wang, Z.; Ali, J.; Wei, D.; Sun, Y.; Liu, F.; Wan, M.; Liu, J.; Huo, L. *Adv. Energy Mater.* **2019**, 9, 1802686.

手性共轭分子材料

姜玮¹¹清华大学化学系, 北京, 100084

*Email: jiangwei2021@mail.tsinghua.edu.cn

手性是分子的重要性质之一, 不仅与生命现象密切相关, 也显著影响化学反应及材料性能。近年来, 基于手性的 π -共轭分子体系已被逐渐尝试性地应用到了诸多有机光电子器件领域中, 如有机电致发光器件、有机场效应晶体管、有机太阳能电池等, 在手性光的检测、发射, 控制电子自旋以及电荷传输, 光开关以及分子机器等显示出独特且不可替代的应用前景。然而, 手性功能 π -共轭分子材料的合成、组装与光电器件研究仍然充满挑战。报告人聚焦特色芳酰亚胺, 利用其大的 π -共轭结构和优异的光电特性, 精准构建了系列含酰亚胺功能单元的手性共轭分子, 研究其在有机场效应晶体管、有机太阳能电池、圆偏振发光等领域的功能应用, 揭示了酰亚胺功能化的手性共轭分子优异的电荷传输性能、光电转化性能以及圆偏振发光性能。

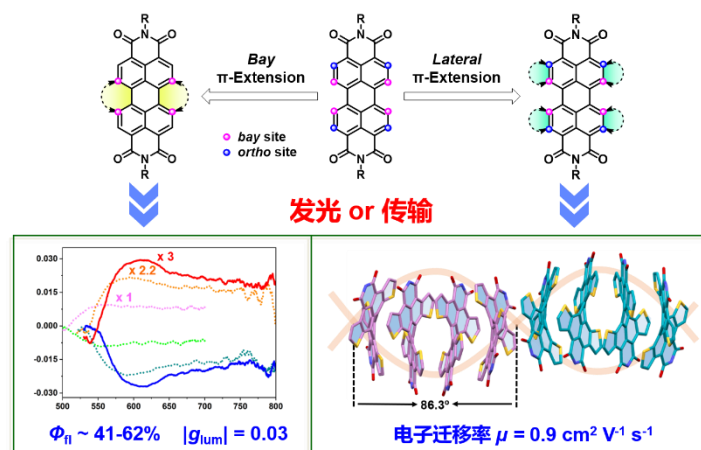


Fig. 1 手性共轭分子设计策略及性能

关键词: 手性; 共轭分子; 芳酰亚胺; 电荷传输; 圆偏振发光

参考文献

- [1] Zeng, C.; Xiao, C.; Feng, X.; Zhang, L.; Jiang, W.*; Wang, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*: 10933-10937.
- [2] Liu, B.; Böckmann, M.; Jiang, W.*; Doltsinis, N. L.; Wang Z.* *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 7092-7099.
- [3] Liu, Y.; Ma, Z.; Wang, Z.; Jiang W.* *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*: 11397-11404.
- [4] Jiang W.; Wang, Z.* *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*: 14976-14991.

基于有机电化学晶体管的葡萄糖传感器制备与性能优化

姜紫灵¹, 张凤娇^{1,*}

¹中国科学院大学化学科学学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

*E-mail: fjiaozhang@ucas.ac.cn

快速、准确地检测血液以及汗液中葡萄糖水平对人体健康监测以及糖尿病的诊断极其重要。在过去的几十年中,葡萄糖生物传感器被广泛研究。有机电化学晶体管(Organic electrochemical transistors, OEETs)具有制备工艺简单、成本低、生物相容性好、柔性可穿戴等特点。OEET可以实现多参数信号转换和信号放大,是发展高灵敏生物传感器的有效载体。近年来,基于 OEET 的生物传感器广泛应用于生物分子^[1]、细胞^[2]及电生理活动^[3]等的检测。但在实际体液成分监测中,由于生理环境复杂,大量的离子和分子严重干扰检测的灵敏性与特异性。引入分子探针是提高选择性的有效方式,但德拜屏蔽的影响干扰了信号的高效传递,且如何实现大面积均匀的制备亦是一个难题。因此如何创建有效的探针接枝,发展柔性可穿戴的葡萄糖灵敏响应OEET是重要研究方向。

针对上述问题,本工作提出大面积薄膜印制加工策略沉积聚合物活性层,通过界面物理处理以及材料包覆作用实现葡萄糖氧化酶的接枝;系统分析电解质溶液、薄膜微观形貌与葡萄糖传感性能的关系,实现在血液中和汗液中对葡萄糖分子的高选择性的灵敏检测,探究德拜屏蔽对传感性能的影响。结合器件结构设计和测试盒构建,实现柔性传感晶体管的制备,为其在便携式健康信号采集应用领域提供有效方法。

关键词: 有机电化学晶体管; 生物传感器; 葡萄糖检测

参考文献

- [1] Liao, C.; Zhang, M.; Niu, L.; Zheng, Z.; Yan, F., *J. Mater. Chem. B*. **2013**, **1** (31), 3820-3829.
- [2] Lin, P.; Yan, F.; Yu, J.; Chan, H. L.; Yang, M., *Adv. Mater.* **2010**, **22** (33), 3655-3660.
- [3] Leleux, P.; Rivnay, J.; Lonjaret, T.; Badier, J.-M.; Bénar, C.; Hervé, T.; Chauvel, P.; Malliaras, G. G., *Adv. Healthc. Mater.* **2015**, **4** (1), 142-147.

功能螺环分子的构筑与应用

蒋佐权*

苏州大学，江苏省苏州市工业园区仁爱路 199 号，215123

*Email: zqjiang@suda.edu.cn

有机螺环具有特殊的三维正交结构，这种结构被用于设计各类共轭功能材料中，其中在OLED材料的应用尤为广泛。无论是第一代荧光发光到第二代磷光发光还是第三代热激活延迟荧光（TADF）材料，都可以看到有机螺环的身影。通过合理的合成路线设计，研究人员可以精确的调控螺环骨架上的衍生位点，发展新的螺环骨架，最终将其应用于高性能OLED的主体与客体发光材料中。其中，通过C1位点与螺环中心空间靠近这一特点，并利用其刚性结构限制化学键的自由旋转，可以构筑限域电荷转移型发光分子，实现OLED器件效率的突破。此外，还可以利用这种结构所构筑的近距离空间位阻，抑制多重共振发光分子平面的聚集，优化其发光器件性能。总体来说，螺环结构具有高热稳定的传统优点，其非共轭螺环中心将其分成两个共轭片段，这两个共轭片段之间的作用方式对材料的设计起着决定性的作用，如何设计和构筑这些螺环结构并加以合理应用值得进一步的探索。

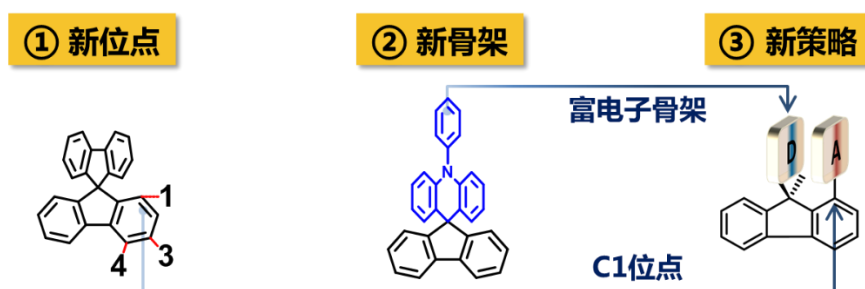


Fig. 1 The modification on the substitution site and backbone of spiro compounds

关键词： OLED；螺环结构；发光材料；热活化延迟荧光

参考文献

- [1] Yang, S. Y.; Qu, Y. K.; Liao, L. S.; Jiang, Z. Q.; Lee S. T. *Adv. Mater.*, **2022**, doi.org/10.1002/adma.202104125.
- [2] Qu, Y. K.; Zheng, Q.; Fan, J.; Liao, L. S.; Jiang, Z. Q. *Acc. Mater. Res.*, **2021**, **2**: 1261.
- [3] Qu, Y. K.; Zhou, D. Y.; Kong, F. C.; Zheng, Q.; Tang, X.; Zhu, Y. H.; Huang, C. C.; Feng, Z. Q.; Fan, J.; Adachi, C.; Liao, L. S.; Jiang, Z. Q. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, doi.org/10.1002/anie.202201886.
- [4] Wang, X. Q.; Yang, S. Y.; Tian, Q. S.; Zhong, C.; Qu, Y. K.; Yu, Y. J.; Jiang, Z. Q.; Liao, L. S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, **60**: 5213.
- [5] Tang, X.; Cui, L. S.; Li, H. C.; Gillett, A. J.; Auras, F.; Qu, Y. K.; Zhong, C.; Jones, S. T. E.; Jiang, Z. Q.; Friend, R. H.; Liao, L. S. *Nat. Mater.*, **2020**, **19**: 1332.

X-XXX

基于有机半导体单晶的高性能线性偏振光发射与探测器件

揭建胜*, 贾若飞, 潘京, 张秀娟*

苏州大学功能纳米与软物质研究院 (FUNSOM), 苏州, 215123

*Email: jsjie@suda.edu.cn; xjzhang@suda.edu.cn

有机半导体单晶由于其固有的面内各向异性, 是实现本征偏振光发射与探测的理想材料。传统的线性偏振光发射与探测器依赖于体积较大且复杂的光学系统, 通常需要将发光光源或光电二极管和偏振片结合起来实现偏振光发射与探测。与之相比, 具有本征各向异性的有机半导体单晶可实现本征的偏振光发射与探测, 是构筑新一代微型化片上集成式偏振光发射与探测器的理想材料体系。基于此, 我们构筑了基于有机半导体单晶的高效电致发光器件, 实现了高偏振度的本征线性偏振光发射。此外, 我们提出了一种新的各向异性光电流放大策略, 突破了半导体材料的本征各向异性限制, 在有机光电晶体管中实现了超过2000倍的偏振灵敏度增强, 器件二向色比达到 10^4 以上。由于偏振光包含了光的偏振态信息, 能够极大拓展光信号携带信息的维度。因此, 基于有机半导体单晶的偏振光发射与探测器件有望应用于保密光通讯、偏振成像、生物分析、环境监测, 以及导航传感等诸多领域, 具有广阔的应用前景。

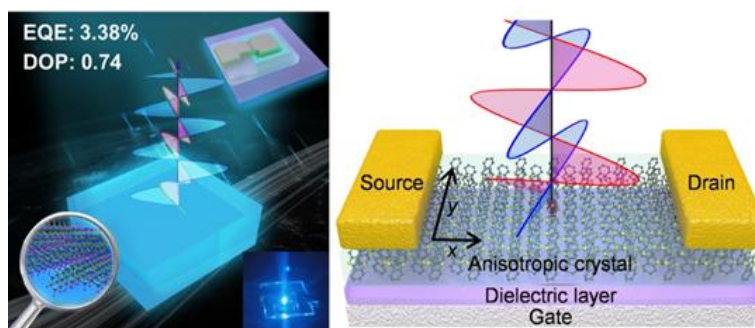


图1. 基于有机半导体单晶的线性偏振光发射及偏振探测

关键词: 有机半导体单晶; 线性偏振光发射与探测; 单晶电致发光二极管; 单晶光电晶体管; 各向异性电荷捕获效应

参考文献

- [1] Pan, J.; Wu, Y.; Zhang, X. et al. Nat. Commun. 2022, 13, 6629.
- [2] Jia, R.; Li, J.; Zhang, H. et al., Adv. Mater. 2022, DOI: 10.1002/adma.202208789.
- [3] Zhang, H.; Yu, T.; Wang, C. et al., ACS Nano 2022, 16, 6394.
- [4] Shi, J.; Jie, J.; Deng, W. et al., Adv. Mater. 2022, 34, 2200380.
- [5] Deng, W.; Lei, H.; Zhang, X. et al. Adv. Mater. 2022, 2109818.

有机光电材料结构与性能

解增旗*

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室，广州市五山路 381 号，510640

*Email: msxiez@scut.edu.cn

有机光电功能材料中的几个**核心科学难题**：（1）如何在一个材料体系同时实现高固态发光效率与高迁移率？（2）如何在可见光区透明的宽带隙材料中实现高电导率？（3）如何在一个材料体系同时实现稳定的氧化态与还原态？

针对以上难题，从“结构—性能”关系的角度开展研究，获得了以下研究成果：（1）首次发现并命名了罕见的分子聚集模式（X-聚集与M-聚集），测定了茈萘亚胺M-聚集体中激子局域化的特征，设计制备了兼具高固态发光效率与高载流子迁移率的新材料，实现发光与迁移性能的双重突破[1]；（2）创新制备了一类具有“光活性”特征的电子传输材料，将吸收可见光的茈萘亚胺分子掺杂到传统宽带隙电子传输材料中，利用光致电子转移大幅度提高电子传输材料电导率[2]；（3）设计并合成了一类氧化、还原性能独立可调的给体-节点-受体（D-n-A）型双极性聚合物，通过“节点（node）”隔离氧化功能基团与还原功能基团的策略，获得了兼具稳定的氧化态与稳定的还原态的聚合物，实现了n-型掺杂与p-型掺杂电容量近似相等的双极性电极材料[3]。

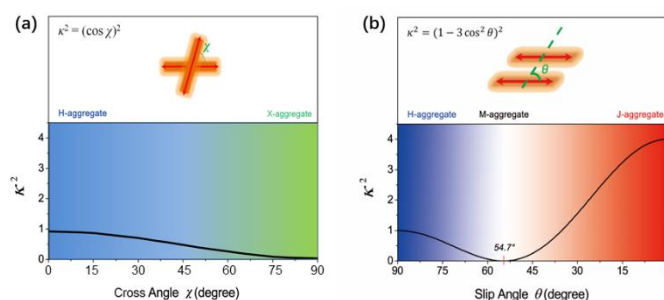


Fig. 1 Aggregation Models for H-, J-, X- and M-aggregates.

关键词：聚集结构；发光；迁移；取向因子；相互作用

参考文献

- [1] Zhou, J.; Zhang, W.; Jiang, X.-F.; Wang, C.; Zhou, X.; Xu, B.; Liu, L.; Xie, Z.; Ma, Y. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*: 596.
- [2] Wen, X.; Nowak-Król, A.; Nagler, O.; Kraus, F.; Zhu, N.; Zheng, N.; Müller, M.; Schmidt, D.; Xie, Z.; Würthner, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*: 13051.
- [3] Wang, H.; Jiang, N.; Zhang, Q.; Xie, G.; Tang, N.; Liu, L.; Xie, Z. *Macromolecules*, **2021**, *54*: 3469

Interface Defects Tuning in Polymer-Perovskite Phototransistors for Visual Synapse and Adaptation Functions

Junhua Kuang (匡俊华)^{1,2}, Kai Liu^{1,2}, Minghui Liu^{1,2}, Mingchao Shao^{1,2}, Mingliang Zhu^{1,2}, Guocai Liu^{1,2}, Wei Wen^{1,2}, Jinyang Chen^{1,2}, Mingcong Qin^{1,2}, Zhichao Pan^{1,2}, Zhiyuan Zhao¹, Yunqi Liu¹, Yunlong Guo^{1,*}

¹Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, Key Laboratory of Organic Solids, Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P.R. China

²School of Chemistry and Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P. R. China

Email: guoyunlong@iccas.ac.cn

Artificial sensory nerves can simulate the functions of visual perception and information processing of the human brain, which is indispensable for the immediate visualization of the environment and awareness requisite to avoid the potential harm. However, it still remains a long-standing challenge to integrate recognition learning with real-time processing function in a single device. Herein, an interface defects-tuning strategy is proposed for developing a novel bi-functional phototransistor. Benefiting from the tuned polymer-perovskite layer-heterointerface defects, the photogenerated charge trapping and de-trapping capacities were significantly improved, thereby facilitating the photogenerated carrier separation and injection. The prepared organic-inorganic hybrid phototransistors could perfectly mimic the human visual synaptic behaviors with a quick response speed (< 35 ms, far below that of human eyes to incident light (225 ms)). More importantly, the phototransistor exhibited obvious visual adaptations toward wide-ranging light stimuli, and realized unique desensitization to simulate the self-protection behavior of the human visual systems. Specifically, the adaptation timescales of the device under dim and high light conditions were superior to bio-systems (< 2 min). Consequently, the reported strategy for the preparation of bi-functional phototransistors provides a brand-new perspective for next-generation artificial nervous systems.

Keywords: polymer-perovskite heterojunction, interface defects, phototransistors, photonic synapse, photoadaptation

High Crystalline Single Layer Two-dimensional Covalent-Organic Frameworks Film for Flexible Nonvolatile Resistance Memory

Lei Liu¹, Shengbin Lei (雷圣宾)^{1*}, Wenping Hu¹

¹Department of Chemistry, Tianjin University, Weijin Road 92, Tianjin, 300072

*Email: shengbin.lei@tju.edu.cn

Large-scale growth of highly crystalline single layer two-dimensional polymers (SL-2DPs) and their subsequent integration into memristors is key to advancing the development of high-density data storage devices. However, leakage problems resulting from the porous structure of 2DPs continue to make such advances extremely challenging. Herein, we overcome this issue by incorporating long alkoxy chains into key molecular building blocks to obtain a highly crystalline 2DP, and prevent metal permeation in the subsequent device fabrication process. SL-2DP memristors constructed via direct evaporation of the top electrodes exhibit low variability ($\sigma_{V_{set}} = 0.14$) due to the single-monomer-thick feature together with the high regular structure and coordination ability which minimizes the stochastic spatial distribution of conductive filaments (CFs) in both vertical and lateral dimensions. Using peak force tunnelling atomic force microscopy, we demonstrate the nanometer scalability ($<50 \text{ nm}^2$) and low power consumption of these molecular memristor devices.

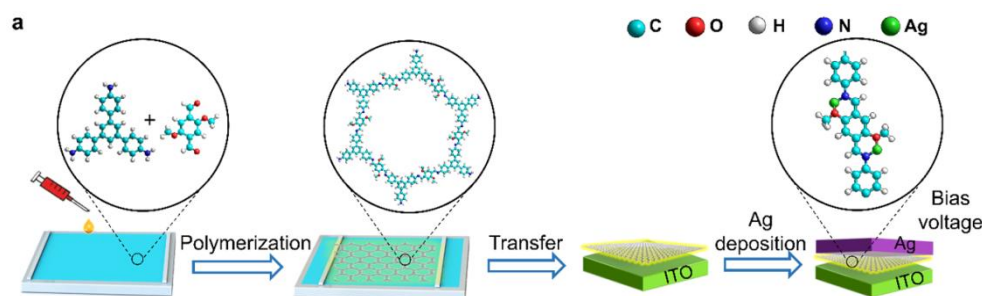


Fig. 1 Schematic illustration of the synthesis and fabrication of SL-2DP memristors.

Keywords: molecular memristor, single layer two-dimensional polymer, scalability, low variability, flexible devices

Reference

[1] Lei Liu, Lingli Wu, Shengbin Lei, Wenping Hu, *Adv. Mater.*, 2023, DOI:10.1002/adma.202208377.

半透明有机光伏电池与材料

李昌治*

¹ 浙江大学高分子科学与工程学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: czli@zju.edu.cn

有机光伏半导体为太阳能电池器件提供了兼具轻、薄、柔和吸光带隙可调的新材料体系, 从而可发展出不同于无机晶态光伏的新型光伏器件与应用。针对半透明太阳能电池中高光学透过和高光电转换相互制约的核心矛盾, 本次报告中, 我们介绍课题组发展的有机半导体掺杂新方法、分子策略和器件结构, 结合电极和光子晶体的集成设计, 实现器件透过光谱的精准调制, 构建了高效半透明有机太阳能电池和组件。

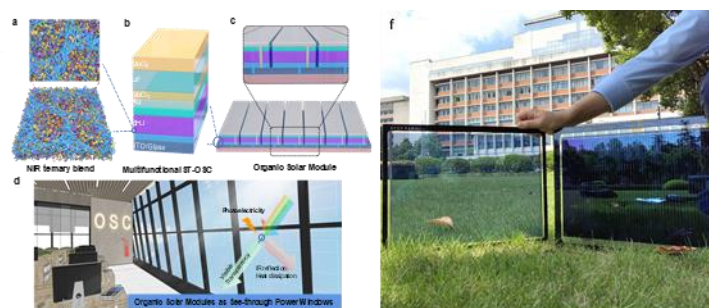


Fig. 1 See-through power windows via organic solar modules

关键词: 有机半导体; 太阳能电池; 半透明

参考文献

- [1] D. Wang, C.-Z. Li* et al., *Energy Environ. Sci.*, 2022, DOI: 10.1039/D2EE00977C
- [2] J.-Y. Fang, Z.-X. Liu*, C.-Z. Li* et al., *Adv. Mater.*, 2022, 34, DOI: 10.1002/adma.202110569
- [3] D. Jiang, C.-Z. Li* et al., *ACS Energy Lett.*, 2022, 7, 1764 Zhang, S.; Li, S.; Zhou, W.; Zheng, L. *Chem. Phys.* **2011**, **135**: 14304.

High areal loading 2D titanium carbide electrochemical capacitor with hierarchical pore structure

Chun Li (李春)^{1,*}, Hongwu Chen¹

¹Department of Chemistry, Tsinghua University, Haidian District, Beijing, 100084

*Email: chunli@mail.tsinghua.edu.cn

High areal loading of active materials is required for the practical application of electrochemical capacitors. However, it remains a challenge to simultaneously improve the areal and volumetric capacitance^[1]. Increasing packing density leads to high volumetric capacitance but brings poor mass transport in electrodes, which lowers the utilization efficiency of active materials. On the contrary, low packing density is unable to induce high volumetric capacitance. Herein, a strategy to construct high areal mass loading electrochemical capacitor is proposed, using a material with intercalation pseudocapacitance—2D titanium carbide MXene. Hierarchical pores with sizes ranged between nanometers and micrometers are introduced in the electrode, which induces the high packing density and better mass transport behavior. Compression of expanded MXene powders produces electrodes with hierarchical pores. The related electrochemical capacitor shows areal capacitance of 11.4 F cm^{-2} and volumetric capacitance of 770 F cm^{-3} at the same time^[2].

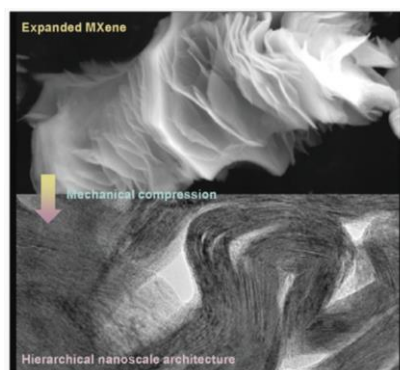


Fig. 1 Evolution of morphology in MXene electrodes with hierarchical pore structure

Keywords: 2D titanium carbide, MXene, electrochemical capacitor, microscopic pore structure, high areal loading

Reference

- [1] Choi, C.; Ashby, D. S.; Butts, D. M.; DeBlock, R. H.; Wei, Q. L.; Lau, J.; Dunn, B. *Nat. Rev. Mater.* **2020**, *5*: 5.
- [2] Chen, H.; Wang, H.; Li, C. *Adv. Mater.* **2022**, *34*: 2205723.

Energy transfer between Singlet, triplet and doublet

Feng Li (李峰)^{1,*}

¹ State Key Laboratory of Supramolecular Structure and Materials, College of Chemistry, Jilin University, Qianjin Avenue 2699, Changchun, 130012, P. R. China

*Email: lifeng01@jlu.edu.cn

Förster-type and Dexter-type energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons can effectively occur in principle. But there are almost no experimental results about the energy transfers due to the scarcity of stable luminescent radicals. Since we firstly reported the doublet electroluminescent in 2015, a number of stable luminescent radicals with high PLQEs have been developed. Using these radicals, we have studied the energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons [1-3]. In this talk, I will show and discuss some experimental results about the energy transfers between singlet, triplet and doublet excitons.

Keywords: Singlet, triplet, doublet, energy transfer

Reference

- [1] F. Li#, A.J. Gillett#, Q. Gu, J. Ding, Z. Chen, T.J.H. Hele, W.K. Myers, R.H. Friend*, E.W. Evans*, Singlet and triplet to doublet energy transfer: improving organic light-emitting diodes with radicals, *Nature communications*, 13 (2022) 2744.
- [2] Y. Chen, L. Yang, Y. Huang, A. Obolda, A. Abdurahman, Z. Lu*, F. Li*, Highly Efficient Fluorescent Organic Light-Emitting Devices Using a Luminescent Radical as the Sensitizer, *The journal of physical chemistry letters*, 10 (2019) 48-51.
- [3] J. Han, Y. Jiang, A. Obolda, P. Duan*, F. Li*, M. Liu*, Doublet-Triplet Energy Transfer-Dominated Photon Upconversion, *The journal of physical chemistry letters*, 8 (2017) 5865-5870.

稳定超级苯醌的合成及其光电磁学性能

李光武¹

¹南开大学电子信息与光学工程学院，天津市津南区海河教育园区同砚路 38 号，300350

*Email: ligw@nankai.edu.cn

有机开壳共轭分子的前线轨道 π 电子是部分成键的，表现出自由基的特征，非成键态自由基之间存在自旋耦合作用，因此，有机开壳共轭材料具备独特的光电磁学性质。超级苯醌具有特殊的芳香稠环与醌式结构，以及内禀的双自由基特征 ($y_0 \approx 30\%$)，引起广泛的研究兴趣，但是其内在的双自由基特性，导致超级苯醌的稳定性较差，申请人通过多种合成策略在活性位点引入保护基来提高超级苯醌的稳定性，从而首次实现了稳定超级苯醌的合成，并且揭示了出超级苯醌独特的开壳自由基特性和磁学活性。我们还揭示了“醌式结构”与“芳香化苯环”之间的关系：随着“醌式结构”数目的增多，超级苯的“芳香性苯环”数目逐渐减少，在达到六个醌式时，“芳香性苯环”减少为零，此研究为实现“稠环芳烃体系”的“去芳香化”提供了新的思路。

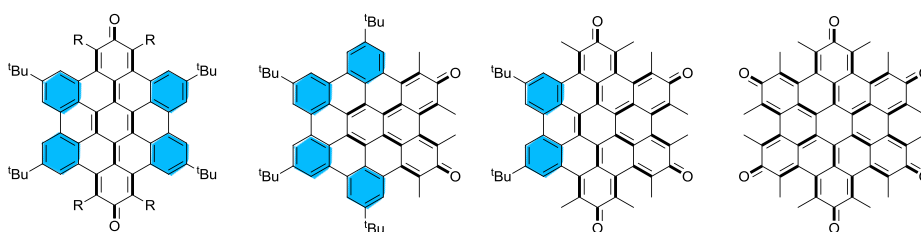


Fig. 1 Chemical Structures of Superbenzoquinones

关键词： 超级苯醌；有机共轭自由基；有机磁性材料

参考文献

- [1] Li G.; Phan H.; Heng T. S.; Gopalakrishna T. Y.; Liu C.; Zeng W.; Ding J.; Wu J.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, **56**, 5012.
- [2] Li G.; Han Y.; Zou Y.; Lee J. J. C.; Ni Y.; Wu J.; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, **58**, 14319.
- [3] Li G.; Matsuno T.; Han Y.; Phan H.; Wu S.; Jiang Q.; Zou Y.; Isobe H.; Wu J.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, **59**, 9727.
- [4] Telychko M.; Li G.; Mutombo P.; Soler-Polo D.; Peng X.; Su J.; Song S.; Koh M. J.; Edmonds M.; Jelinek P.; Wu J.; Lu J.; *Sci. Adv.*, **2021**, **7**, eabf0269

X-XXX

北京同步辐射装置 1W1A 线站掠入射实验方法及其在共轭聚合物凝聚态结构表征的应用

李鸿祥¹, 陈雨^{2*}, 程沛^{1,*}, 韩艳春^{3,*}

¹ 四川大学高分子科学与工程学院, 四川省成都市武侯区一环路南一段 24 号, 610065

² 中国科学院高能物理研究所, 北京市石景山区玉泉路 19 号乙院, 100049

³ 中国科学院长春应用化学研究所, 吉林省长春市朝阳区人民大街 5625 号, 130021

*Email: lihongxiang@scu.edu.cn

北京同步辐射装置漫散射实验站利用1W1A光束线提供的双聚焦单色X射线, 开展晶体及薄膜材料的结构研究。该实验站可开展高分辨衍射(XRD)、低角反射(XRR)、掠入射衍射(GIXRD)、掠入射广/小角散射(GIWAXS/GISAXS)等实验方法。近年来, 溶液加工共轭聚合物由于其独特的光电性质、优异的机械性能和环境稳定性而得到了广泛研究。其中GIWAXS/GISAXS是表征共轭聚合物凝聚态结构的重要方法。为此, 我们对线站掠入射实验方法进行了升级和优化。通过更新EIGER 1M探测器并减弱杂散光干扰, 使单个样品曝光时间由300 s缩短至20 s。并开发了掠入射远程快速换样平台, 可实现棚屋外远程测试操作, 极大缩短测试时间并且可实现用户远程线上测试操作。随后, 我们更进一步搭建了原位蒸汽处理、原位热退火、原位滴涂、原位旋涂、原位刮涂和GISAXS测试平台, 丰富了线站掠入射测试方法。未来依托1W1A漫散射光束线站可对溶液加工共轭聚合物结晶行为、成膜过程、结晶及相分离尺寸和薄膜结构进行更加深入的研究。

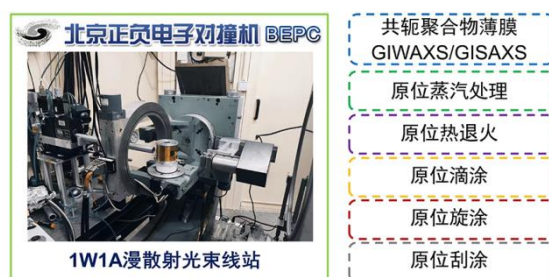


Fig. 1 Application of 1W1A scattering station to the characterization of condensed state structure of conjugated polymers.

关键词: 共轭聚合物凝聚态结构; 1W1A漫散射光束线站; GIWAXS; GISAXS

参考文献

- [1] Yan, C.; Cheng, P.*; et, al. *Adv. Energy Mater.* **2022**, **12**: 2201087.
 [2] Li, H.; Chen, Y.; Han, Y.*; et, al. *Macromolecules.* **2021**, **54**: 10557.
 [3] Li, H.; Chen, Y.*; Han, Y.*; et, al. *Macromol. Rapid Commun.* **2022**, **43**: 2200084.

液栅石墨烯晶体管传感器在健康监测中的应用研究

李金华*, 邓明华, 王贤保

湖北大学材料科学与工程学院, 武汉, 430062

*Email: jinhua_li@hubu.edu.cn

便携式健康监测设备可以解决全球人口老龄化加剧而带来的医疗资源不足的难题, 而目前对重大疾病监测需要复杂的程序和昂贵的大型设备。液栅石墨烯晶体管传感器具有高灵敏度和易集成等优点, 在健康监测等方面极具潜力。通过在晶体管栅电极上修饰不同的敏感材料(如碳量子点、小分子、DNA、适配体和 CRISPR-Cas 等), 利用敏感材料和不同分析物之间的相互作用, 可以合理地设计出对目标物(如离子、小分子、DNA、RNA 和蛋白质等)有高灵敏度和高选择性的传感器。高灵敏度来源于液栅型石墨烯晶体管固有的信号放大能力, 而高选择性则来源于分析物与敏感材料的特异性结合。我们尝试制造了离子¹、DNA²、RNA^{3,4}和蛋白质⁵传感器, 开发便携式检测设备, 它们的检测极限分别可以达到 $1.0 \times 10^{-18} \text{ M}^1$ 、 $1.0 \times 10^{-18} \text{ M}^2$ 、 $1.0 \times 10^{-20} \text{ M}^3$ 和 $1.0 \times 10^{-15} \text{ M}^5$, 相比其他检测方法检测限降低了约 2~4 个数量级。并且具有极短的响应时间和便携式检测的优势。结合超高灵敏度、高选择性和机械柔性, 该技术为开发高性能便携式无创健康监测设备提供一种思路。

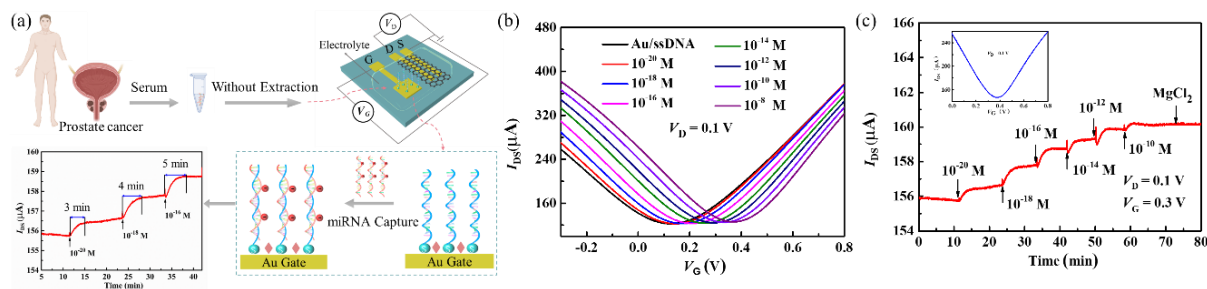


Fig. 1³ (a) Schematic diagram of unamplified detection of label-free miRNA-21 using the ssDNA-functionalized SGTs biosensor. (b) Transfer curves of the biosensor at the diverse miRNA-21 concentrations. (3) Real-time channel current response (I_{DS}) of the biosensor at diverse miRNA-21 concentrations.

关键词: 液栅石墨烯晶体管; 传感器; 健康监测; 便携式检测

参考文献

- [1] Xiao, B.; Li, J.; Guo, S.; Zhang, Y.; Peng, M.; Yu, H.; Deng, M.; Wang, J.; Yu, L.; Wang, X. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, *14*, 1626-1633.
- [2] Deng, M.; Li, J.; Xiao, B.; Ren, Z.; Li, Z.; Yu, H.; Li, J.; Wang, J.; Chen, Z.; Wang, X. *Anal. Chem.* **2022**, *94*, 3320-3327.
- [3] Deng, M.; Ren, Z.; Zhang, H.; Li, Z.; Xue, C.; Wang, J.; Zhang, D.; Yang, H.; Wang, X.; Li, J. *Adv. Sci.* **2023**, *10*, 2205886.
- [4] Yu, H.; Zhang, H.; Li, J.; Zhao, Z.; Deng, M.; Ren, Z.; Li, Z.; Xue, C.; Li, M. G.; Chen, Z. *ACS Sens.* **2022**, *7*, 3923-3932.
- [5] Yu, H.; Zhao, Z.; Xiao, B.; Deng, M.; Wang, Z.; Li, Z.; Zhang, H.; Zhang, L.; Qian, J.; Li, J. *Anal. Chem.* **2021**, *93*, 13673-13679.

有机半导体的失稳机制与增稳策略研究

李立强^{1,*}

¹天津大学分子聚集态科学研究院，天津市南开区卫津路92号，300072

*Email: lilq@tju.edu.cn

有机半导体是新一代半导体材料，在柔性显示、电路、传感等诸多领域具有广阔的应用前景，是具有千亿美元规模的新兴产业领域。有机半导体材料的性能与器件研究已取得巨大进步，但制约其走向实用化的瓶颈问题：稳定性问题，仍然没有解决。

报告人一直聚焦有机半导体材料与晶体管器件的稳定性问题，从应力、热、光稳定性三个层面做了如下工作（图1）：1）针对器件保存稳定性差的问题，揭示了应力驱动的有机半导体聚集态结构失稳机制，开发了应力应变平衡增稳方法，构建了超5年长寿命晶体管。2）揭示了热致失稳机制，发展了分子钉扎与晶界势垒工程协同增稳策略，构建了具有优异热稳定性的有机晶体管。3）揭示了光致失稳机制，发展了极化子—激子淬灭增稳策略，开发了本征无光电响应的半导体材料和可抑制半导体光电响应的介电层材料，构建了强光辐照下稳定工作的有机晶体管。本报告将分别介绍上述三项工作。

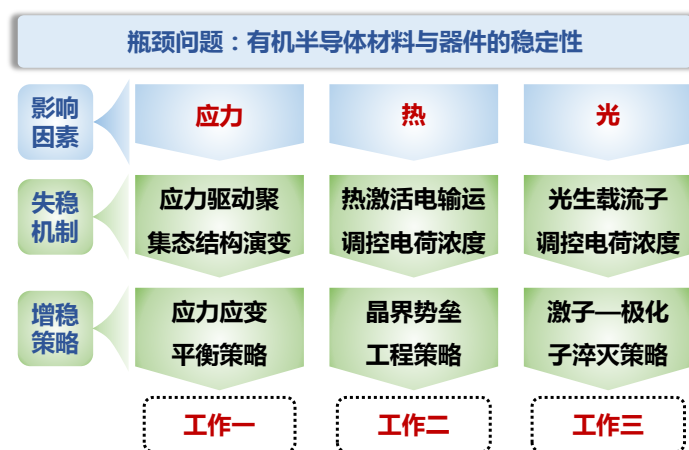


图 1. 稳定性研究的整体思路

关键词：有机半导体；晶体管；稳定性；失稳机制；增稳策略

参考文献

- [1] Chen, X.; Wang, Z.; Qi, J.; Hu, Y.; Huang, Y.; Sun, S.; Sun, Y.; Gong, W.; Luo, L.; Zhang, L.; Du, H.; Hu, X.; Han, C.; Li, J.; Ji, D.; Li, L.; Hu, W.; *Nat. Commun.*, **2022**, *13*: 1480.
- [2] Zhang, H.; Hu, Y.; Chen, X.; Yu, L.; Huang, Y.; Wang, Z.; Wang, S.; Lou, Y.; Ma, X.; Sun, Y.; Li, J.; Ji, D.; Li, L.; Hu, W.; *Adv. Funct. Mater.*, **2022**, 2111705.
- [3] Wang, Z.; Lin, H.; Zhang, X.; Li, J.; Chen, X.; Wang, S.; Gong, W.; Yan, H.; Zhao, Q.; Lv, W.; Gong, X.; Xiao, Q.; Li, F.; Ji, D.; Zhang, X.; Dong, H.; Li, L.; Hu, W.; *Sci. Adv.*, **2021**, *7*: eabf8555.
- [4] Huang, Y.; Gong, X.; Meng, Y.; Wang, Z.; Chen, X.; Li, J.; Ji, D.; Wei, Z.; Li, L.; Hu, W.; *Nat. Commun.*, **2021**, *12*: 21.
- [5] Chen, Z.; Duan, S.; Zhang, X.; Geng, B.; Xiao, Y.; Jie, J.; Dong, H.; Li, L.; Hu, W.; *Adv. Mater.*, **2021**, 2104166.
- [6] Wang, Z.; Guo, S.; Li, H.; Wang, B.; Sun, Y.; Xu, Z.; Chen, X.; Wu, K.; Zhang, X.; Xing, F.; Li, L.; Hu, W.; *Adv. Mater.*, **2019**, *31*: 1805630.

多级结构偏振敏感光探测器

李明珠^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: mingzhu@iccas.ac.cn

偏振光电探测器是光通讯技术的核心部件之一, 在近场成像、遥感和高分辨探测等领域有着广阔的应用。偏振光探测器要求工作介质要具备优良的光吸收能力和各向异性的光响应能力。受凤蝶翅膀鳞片、具有莫尔效应的双光栅等多级结构的启发, 我们采用纳米压印技术和胶体球刻蚀方法, 制备了具有不对称的形态和高结晶性能的钙钛矿薄膜, 构筑了钙钛矿偏振光电探测器。该探测器表现出优异的偏振光探测性能, 包括高的偏振灵敏度、大光暗电流开关比和高探测率, 能够用于偏振成像, 其探测率与无结构器件相比, 提高了6~7倍。该方法简单易行, 通过简单的制造工艺和较低的生产成本就能实现高通量高质量产出, 为高性能偏振光探测器的设计和制备开辟了新途径。

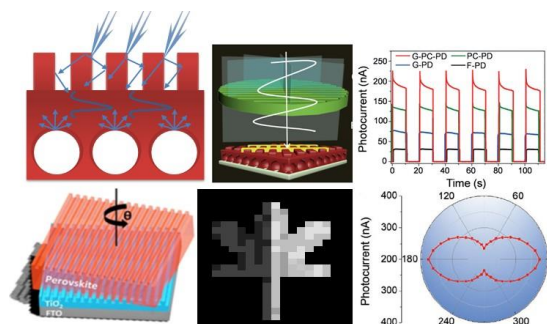


Fig. 1 Micro/nano-structured perovskite photodetector towards highly polarization-sensitive detection and imaging.

关键词: 光电探测器; 偏振敏感; 光栅; 光子晶体

参考文献

- [1] Song, Q.; Wang, Y.; Vogelbacher, F.; Zhan, Y.; Zhu, D.; Lan, Y.; Fang, W.; Zhang, Z.; Jiang, L.; Song, Y.; Li, M. *Adv. Energy Mater.* **2021**, *11*, 2100742.
- [2] Wang, Y.; Lan, Y.; Song, Q.; Vogelbacher, F.; Xu, T.; Zhan, Y.; Li, M.; Sha, W. E. I.; Song, Y. *Colorful Efficient Moire-Perovskite Solar Cells.* *Adv. Mater.* **2021**, *33*, e2008091
- [3] Zhan, Y.; Wang, Y.; Cheng, Q.; Li, C.; Li, K.; Li, H.; Peng, J.; Lu, B.; Wang, Y.; Song, Y.; Jiang, L.; Li, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 16456-16462.

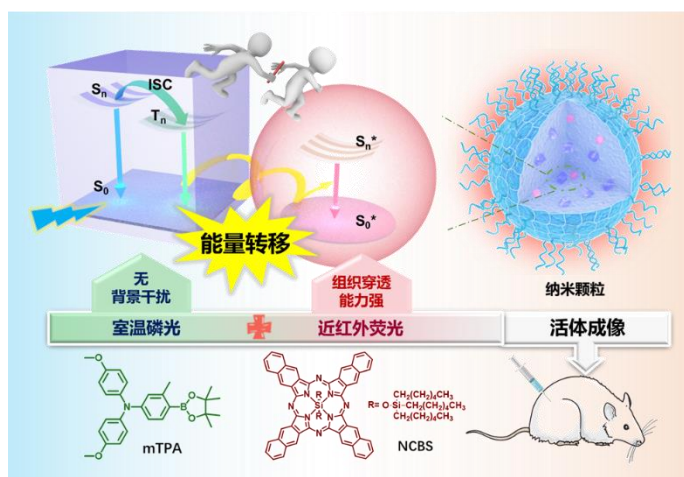
分子聚集态的光功能特性调控

李倩倩

湖北省有机高分子光电功能材料重点实验室，武汉大学化学与分子科学学院，武汉市珞珈山街 16 号，430072

*Email: liqianqian@whu.edu.cn

有机光电功能材料的宏观性能不仅依赖于基元分子自身的理化性质，还取决于其聚集形式。特定的聚集态结构中，分子间弱相互作用的加和与协同可促进体系性能的质变与拓展，获得超越分子本征属性的功能，即“弱力强变化”。因此，开展分子聚集态调控的研究，通过探讨“分子结构-聚集形式-光电性能”间的内在联系和核心影响因素，对揭示聚集态结构的形成规律，提高光电功能体系设计与合成的可控性与预见性等，具有重要的意义。我们的研究主要围绕“分子聚集态结构的内在机制与光电功能应用”而展开，通过纯有机分子排列模式与发光性能的全面分析，建立了发光材料的优势分子聚集态结构，并拓展了其在生物成像中的应用；有效融合不同材料的特性，通过分子聚集态间的相



互作用突破了室温磷光体系的波长局限，发展了光致形变的新体系。

Fig. 1 Room-temperature phosphorescence resonance energy transfer for construction of near-infrared afterglow imaging agents

关键词： 分子聚集态；有机室温磷光；余辉成像；光响应

参考文献

- [1] Dang, Q.; Jiang, Y.; Wang, J.; Wang, J.; Zhang, Q.; Zhang, M.; Luo, S.; Xie, Y.; Pu, K.; Li, Q.; Li, Z. *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 2006752.
- [2] Liao, Q.; Gao, Q.; Wang, J.; Gong, Y.; Peng, Q.; Tian, Y.; Fan, Y.; Guo, H.; Ding, D.; Li, Q.; Li, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 9946-9951.
- [3] Huang, A.; Hu, J.; Han, M.; Wang, K.; Xia, J.; Song, J.; Fu, X.; Chang, K.; Deng, X.; Liu, S.; Li, Q.; Li, Z. *Adv. Mater.* **2021**, *33*, 2005249.
- [4] Li, Q.; Li, Z. *Acc. Chem. Res.* **2020**, *53*, 962-973.
- [5] Wang, J.; Chai, Z.; Wang, J.; Wang, C.; Han, M.; Liao, Q.; Huang, A.; Lin, P.; Li, C.; Li, Q.; Li, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 17297-17302.

界面结晶与二维分子晶体

李荣金*, 胡文平

天津大学, 天津市南开区卫津路 92 号, 300070

*Email: lirj@tju.edu.cn

有机半导体器件的活性层大多是多晶厚膜, 存在缺陷密度高、接触电阻大等难以克服的内在问题。有机晶体质量高、缺陷少, 但大多以微纳晶形式存在, 器件制备困难, 难以集成应用。二维分子晶体为单分子层或数个分子层厚的有机半导体单晶薄膜。二维分子晶体结合了薄膜易集成和单晶高性能的优势, 有望突破有机半导体面临的瓶颈问题。然而二维分子晶体的生长极具挑战, 限制了其性能研究和应用。围绕二维分子晶体, 我们提出表面能决定低维单晶形貌的理论, 并在此基础上进一步提出二维组装分子设计策略; 发明界面结晶法, 实现二维分子晶体的层数可控制备; 提出基于单晶绝缘层制备高性能器件的思路, 揭示薄至单分子层的有机半导体层数依赖的光电性能。

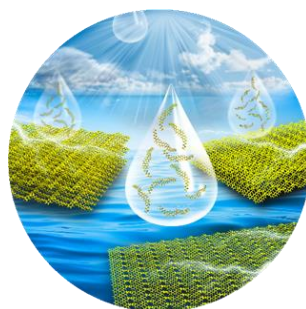


Fig. 1 Interfacial crystallization to produce 2D molecular crystals

关键词: 有机单晶, 界面结晶, 二维分子晶体, 光电器件

参考文献

- [1] Yao, J.; Zhang, Y.; Tian, X.; Zhang, X.; Zhao, H.; Zhang, X.; Jie, J.; Wang, X.; Li, R.; Hu, W., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 16082.
- [2] Fu, B.; Wang, C.; Sun, Y.; Yao, J.; Wang, Y.; Ge, F.; Yang, F.; Liu, Z.; Dang, Y.; Zhang, X.; Shao, X.; Li, R.; Hu, W., *Adv. Mater.* **2019**, 31, 1901437.
- [3] Wang, Q.; Yang, F.; Zhang, Y.; Chen, M.; Zhang, X.; Lei, S.; Li, R.; Hu, W., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 5339.

Unraveling the Stretch-Induced Microstructural Evolution and Morphology–Stretchability Relationships of High-Performance Ternary Organic Photovoltaic Blends

Saimeng Li (李赛萌)¹, Zhongxiang Peng¹, Long Ye^{1,*}

¹School of Materials Science & Engineering, Tianjin Key Laboratory of Molecular Optoelectronic Sciences, Tianjin University, Collaborative Innovation Center of Chemical Science and Engineering (Tianjin), Tianjin, 300350

*Email: yelong@tju.edu.cn

The stretchability and stretch-induced structural evolution of organic solar cells (OSCs) are pivotal for their collapsible, portable, and wearable applications, and they are mainly affected by the complex morphology of active layers. Herein, a highly ductile conjugated polymer P(NDI2OD-T2) is incorporated into the active layers of high-efficiency OSCs based on nonfullerene small molecule acceptors to simultaneously investigate the morphological, mechanical, and photovoltaic properties and structural evolution under stretching of ternary blend films with various acceptor contents. The structural robustness of the blend films is indicated by their stretch-induced structural evolution, which is monitored in real-time by a combination of in situ wide/small angle X-ray scattering. It is found that adding the P(NDI2OD-T2) can enhance the stretchability and structural robustness of ternary blend films by more entangled chains and tie chains to dissipate strain. Furthermore, the stretchability of the ternary blends can be superbly predicted by a 3D equivalent box model.

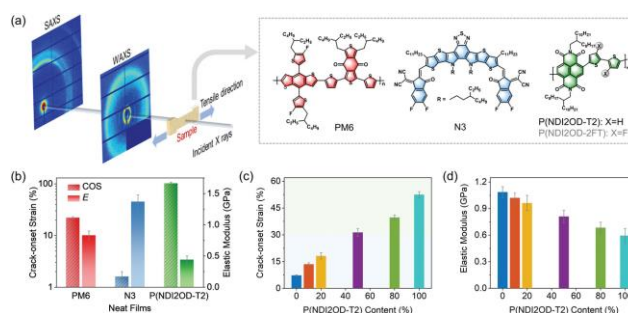


Fig. 1 a) Chemical structures of three conjugated polymers (PM6, P(NDI2OD-T2), P(NDI2OD-2FT)) and a nonfullerene small molecule N3 and schematic illustration of the in situ WAXS/SAXS methodology of organic photovoltaic films under stretching. b) Stretchability and modulus of PM6, N3, and P(NDI2OD-T2) neat films. c) Film stretchability and d) modulus of PM6:N3:P(NDI2OD-T2) blends acquired by FOE. Note that the P(NDI2OD-T2) content mentioned in this work is defined as the weight percentage of P(NDI2OD-T2) in the acceptors.

Keywords: film morphology, mechanical properties, microstructural robustness, organic solar cells, stretchability

Reference

- [1] Peng, Z.; Xian, K.; Liu, J.; Zhang, Y.; Sun, X.; Zhao, W.; Deng, Y.; Li, X.; Yang, C.; Bian, F.; Geng, Y.; Ye L. *Adv. Mater.* **2023**, *35*, 2207884
- [2] Li, S.; Zhou, K.; Sun, B.; Ye L. *Mater. Today Energy* **2022**, *30*, 101166

链接小分子受体同时提升聚合物太阳能电池的效率及稳定性

李尚宇^{1,2}, 张铭¹, 姚嘉¹, 白阳¹, 陈祺¹, 张岑¹, 倪振杰², 张志国^{1,*}

¹北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 邮编 100029

²中国科学院大学, 北京市怀柔区雁栖湖镇 380 号, 邮编 101408

*Email: zgzhang@mail.buct.edu.cn

聚合物太阳能电池(PSCs)以其轻薄柔, 可低成本大规模制备, 易于与建筑一体化集成等优势而备受关注, 然而器件的稳定性成为了 PSCs 商业化道路上的又一大障碍。PSCs 是一种基于共混体相异质结的光伏技术, 然而这种体相异质结结构在热力学上是不稳定的, 共混相的热力学松弛会影响到器件的长期运行稳定性。

不同于使用共轭单元连接 SMA 单元的策略, 本课题组及其合作者发展了通过柔性侧链将 SMA 单元连接的新策略, 同时考察了不同柔性间隔基团的长度来调节“链接受体”的聚集和松弛行为, 以及对光伏性能的影响。

其中基于 TSMA 策略构筑的二聚体 DY2 获得了 17.85% 的高效率, 而 Y6 的效率仅为 16.9%, 效率的提升也得益于器件开路电压的提升。基于 PM6: DY2 的器件在光照下运行 700 小时仍能保持超过 80% 的效率, 同时表现出在 85°C 热应力作用下优异热稳定性。

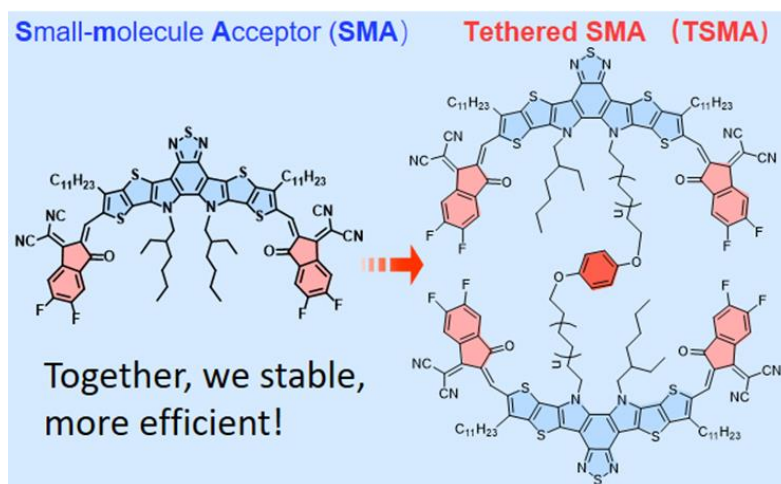


Fig. 1 Molecular structures of TSMA

关键词: 链接小分子受体; 高效率; 高稳定性

参考文献

- [1] Li, S., Zhang, R., Zhang, M., Yao, J., Peng, Z., Chen, Q., Zhang, C., Chang, B., Bai, Y., Fu, H., Ouyang, Y., Zhang, C., Steele, J. A., Alshahrani, T., Roeffaers, M. B., Solano, E., Meng, L., Gao, F., Li, Y., Zhang, Z.-G., *Adv. Mater.* **2023**, *35*, 2206563.

新型偶氮光开关分子的设计合成及应用

李涛^{1,*}

¹上海交通大学化学化工学院, 上海市东川路 800 号, 200240

*Email: litao1983@sjtu.edu.cn

偶氮苯是一种经典的光开关分子, 它能发生可逆的trans↔cis光异构反应, 且两个异构体之间具有大的结构、性质差异, 在光功能分子材料的开发中受到了很大关注。然而, 传统的偶氮苯分子在trans和cis异构体之间的光异构转化率一般不高, 且cis异构体的热稳定性差, 这限制了其光开关能力的发挥。同时, 虽然偶氮光开关在很多领域具有应用潜力, 但材料或器件的性能还有很大的提升空间, 离实际应用还有很长的距离。我们从分子设计的角度出发, 深入认识构效关系, 致力于分子结构创新, 报道了一系列新型杂环偶氮光开关分子, 它们具有双向近定量的光异构比率、灵活可控的光激发波长和大范围可调的cis态半衰期。在此基础上, 我们根据这些新型偶氮分子的不同特点, 分别探索了它们在自组装单分子膜光电/光力器件、分子光储热等领域的应用, 取得了系列进展^[1-5]。

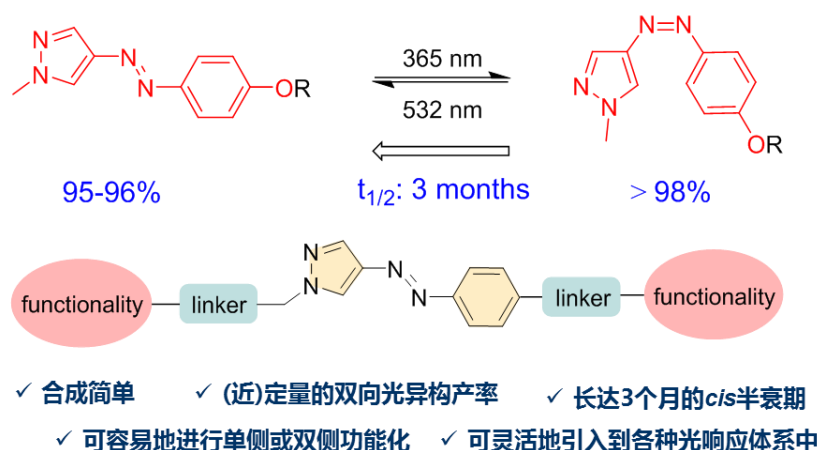


Fig. 1 New heteroaryl azo-switches: facile synthesis, (near)-quantitative photoconversion, long thermal half-life, easy functionalization and versatile applications.

关键词: 偶氮苯; 杂环取代; 构效关系; 分子光储热; 自组装单分子膜

参考文献

- [1] Zhang, Z.; He, Y.; Zhou, Y.; Yu, C.; Han, L.; Li, T. *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*: 13402.
- [2] Zhang, Z.; He, Y.; Wang, Z.; Xu, J.; Xie, M.; Tao, P.; Ji, D.; Moth-Poulsen, K.; Li, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 12256.
- [3] He, Y.; Shangguan, Z.; Zhang, Z.; Xie, M.; Yu, C.; Li, T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*:16539.
- [4] Fang, D.; Zhang, Z.; Shangguan, Z.; He, Y.; Yu, C.; Li, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*: 14502.
- [5] Huang, X.; Shangguan, Z.; Zhang, Z.; Yu, C.; He, Y.; Fang, D.; Sun, W.; Li, Y.; Yuan, C.; Wu, S.; Li, T. *Chem. Mater.* **2022**, accepted.

基于硼氮萘的高性能有机光电材料

李琬卉^{1†}, 杜呈卓^{2†}, 王小野^{1,*}

¹南开大学化学学院元素有机化学国家重点实验室, 天津, 300071

*Email: xiaoye.wang@nankai.edu.cn

近年来, 人们通过以B-N共价单元替代其C=C等电子体的策略, 发展了一类新型硼氮杂稠环芳烃 (BN-PAHs), 这在有机光电材料与器件领域受到了广泛关注。通过在经典的PAHs中引入B-N单元的“骨架工程” (skeleton engineering), 人们已经合成出结构丰富的BN-PAHs。然而, 对其光电性质的研究却仍然落后, 其有机场效应晶体管 (OFETs) 迁移率仍然较低 (尚未超过 $0.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)。在本工作中, 我们提出了通过BN-PAHs的“边缘工程” (periphery engineering) 来实现高性能有机光电材料的策略 (Fig. 1)。基于硼氮萘 (BNA) 骨架, 设计合成了四苯基硼氮萘 (TPBNA) 和二苯基硼氮萘 (DPBNA) 分子。通过调控外围苯基的数量可以显著影响分子的几何构型及固态下分子之间的电子耦合, 使得基于DPBNA的单晶OFET器件表现出高达 $1.3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的空穴迁移率, 远远高于TPBNA单晶。这是目前报道的第一例迁移率可以超过 $1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的BN-PAH, 使得BN-PAHs能够首次跻身于高迁移率有机半导体行列, 并且基于DPBNA单晶的光晶体管也展示出优异的光探测性质, 揭示了BN-PAHs在光电器件中的应用潜力^[1]。

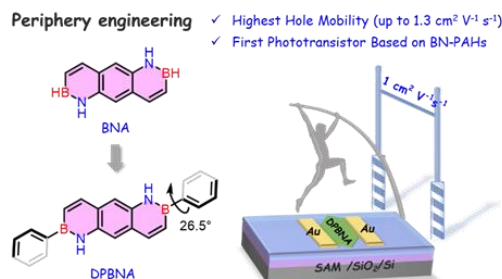


Fig. 1 Periphery engineering of BN-PAHs to explore high-performance semiconductors

关键词: 稠环芳烃; 有机光电材料; 场效应晶体管

参考文献

- [1] W. Li[†], C.-Z. Du[†], X.-Y. Chen, L. Fu, R.-R. Gao, Z.-F. Yao, J.-Y. Wang, W. Hu, J. Pei, and X.-Y. Wang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202201464.

近红外单组分有机太阳能电池

李韦伟¹

¹北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 100029

*Email: liweiwei@buct.edu.cn

双缆共轭高分子材料以给体为主链, 受体为侧链, 给体和受体通过共价键连接。这种分子内给/受体体系可以实现电荷分离与传输, 作为单一组分吸光层应用到有机太阳能电池。我们在前期研究工作中, 发展了大量基于二酞亚胺衍生物为侧链的双缆共轭高分子材料, 获得了高度有序的层状纳米相分离结构, 解决了电荷复合严重的问题, 实现了高效的电荷传输, 获得了效率为8%的单组分电池器件。

但是, 二酞亚胺衍生物的吸收范围窄, 仅在可见光区域, 所以, 发展具有近红外吸收性能的双缆共轭高分子材料, 是提高单组分电池性能的关键。近年来, 以氰基茚二酮为端基的近红外受体应用到双组分电池中, 取得了巨大成功。将这类受体引入到双缆共轭高分子中, 是拓宽吸收和提高电池性能的有效途径。然而, 与二酞亚胺类受体相比, 氰基茚二酮类受体在酸性以及质子性溶剂里敏感, 而且具有独特的三维网状堆积结构。所以, 构建这类双缆共轭高分子, 面临合成以及凝聚态结构调控方面的新问题。

本报告中, 我们将会从合成以及凝聚态结构调控方面, 汇报我们在氰基茚二酮受体类双缆共轭高分子方面的研究工作。我们克服了单体合成、聚合反应中的问题, 并且发展了两种方法, 来调控凝聚态结构, 最终实现了13%的单组分有机太阳能电池器件,。

关键词: 双缆共轭高分子; 单组分有机太阳能电池; 微相分离

参考文献

- [1] Liang, S.; Liu, B.; Karuthedath, S.; Wang, J.; He, Y.; Tan, W. L.; Li, H.; Xu, Y.; Li, N.; Hou, J.; Tang, Z.; Laquai, F.; McNeill, C.; Brabec, C.; Li, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202209316.
- [2] Liang, S.; Xiao, C.; Xie, C.; Liu, B.; Fang, H.; Li, W. *Adv. Mater.* **2023**, DOI: 10.1002/adma.202300629.

有机太阳能电池光生载流子产生动力学研究

李伟^{1*}

¹ 武汉理工大学, 武汉市洪山区珞狮路 205 号, 430010

*Email: liwei1992@whut.edu.cn

不同于P-N结型的无机太阳能电池, 有机太阳能电池是一种激子型的光伏电池, 其在吸收光子后仅能产生被束缚的空穴电子对, 无法在室温下发生自解离。鉴于以上原因, 有机光伏电池的光生载流子产生效率往往较低, 该特点也限制着其光伏转换效率的进一步提高。理解并掌握有机光伏电池的光生载流子产生过程一直是有机光伏领域内的研究热点和难点。本报告将介绍一种有机光伏电池光生载流子产生效率的测试技术, 并用于系列非富勒烯光伏电池中光生载流子产生动力学研究。结果显示, 目前高性能的PM6:Y6体系能获得高达99%载流子产生效率, 而这一数值在PM6: BTP-eC9体系中能达到99.5%。此外, 研究还发现以上微弱的载流子产生效率差异(0.5%)会导致PM6:BTP-eC9获得较PM6:Y6约2.5倍低的载流子复合概率, 使得PM6:BTP-eC9能在300 nm厚的活性层中获得高达16.2%的光伏转换效率。相关的光学/电学模拟也进一步澄清了有机太阳能电池中载流子产生、复合与器件光伏性能的内在联系, 为高性能有机光伏电池的设计和制备提供了物理理论和指导思路。

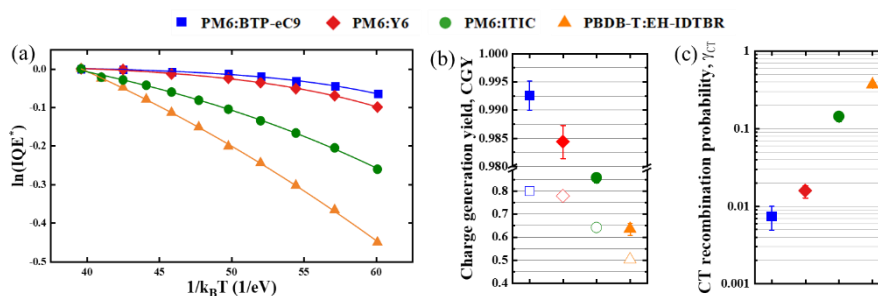


Fig. 1 (a) Temperature dependent IQE, (b) charge generation yield, and (c) recombination probability for 100 nm thick PM6:BTP-eC9, PM6:Y6, PM6:ITIC and PBDB-T:EH-IDTBR solar cells.

关键词: 有机太阳能电池; 光伏器件物理; 量子效率; 光生载流子产生

参考文献

- [1] Meredith, P.; Li, W.; Armin, A. *Adv. Energy Mater.* **2020**, *10*: 2001788.
- [2] Armin, A.; Li, W.; Sandberg, O. J.; Xiao, Z.; Ding, L.; Nelson, J.; Neher, D.; Vandewal, K.; Shoaee, S.; Wang, T.; Ade, H.; Heumüller, T.; Brabec, C.; Meredith, P. *Adv. Energy Mater.* **2021**, *4*: 2003570.
- [3] Zarrabi, N.; Sandberg, O. J.; Zeiske, S.; Li, W.; Riley, D. B.; Meredith, P.; Armin, A. *Nat. Commun.* **2020**, *11*:5567.
- [4] Li, W.; Zeiske, S.; Sandberg, O. J.; Riley, D. B.; Meredith, P.; Armin, A. *Energy Environ. Sci.* **2021**, *14*: 6484.

可溶液印刷高效大面积柔性有机太阳能电池

李耀文*^{1,2}¹苏州大学材料与化学化工学部，苏州市新型半导体材料与器件重点实验室，苏州市，215123²江苏省新型功能高分子设计与应用重点实验室，苏州市，215123

*Email: ywli@suda.edu.cn

有机太阳能电池 (OSCs) 能在塑料基底上真正实现柔性器件制备，有望在便携式能源以及建筑集成光伏(BIPV)市场占据主要份额。然而，柔性大面积OSCs性能仍落后于实验室小面积硬质器件。基于此，我们主要围绕：1) 低面电阻、高透光率新型柔性电极；2) 无后处理高质量大面积活性层展开相应研究工作。针对柔性透明电极，我们通过精确调控Ag⁺在银纳米线 (AgNWs) 溶液中形成Ag过程，控制其在AgNWs接触点处原位生长，获得了兼顾高透过率和低面电阻的AgNWs电极。^[1]进一步利用高粘度聚多巴胺将AgNWs电极、基底以及电子传输层AZO熔为一体，提升电极耐弯曲性。^[2]在大面积活性层方面，提出主客体策略，抑制受体材料聚集的同时诱导了其分子有序组装，优化了大面积薄膜形貌。^[3]还利用可逆逐层涂布刮涂工艺，精确控制了活性层的流体力学，在10×10 cm²活性层中获得了均匀的形貌及良好的相分离。^[4]最终，制备了效率高达14.26%大面积OSCs组件（有效面积36 cm²）。在柔性基底上同样获得了高效率器件，并实现了应用。

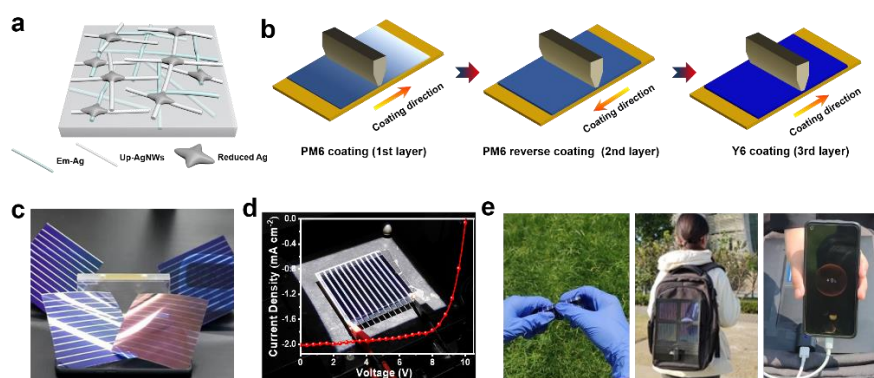


Fig. 1 a) Flexible electrode; b) Schematic diagram of RS-LBL active layer fabrication; c) Flexible OSC modules; d) J - V curve of OSC modules; e) Application of flexible OSC modules.

关键词： 柔性；有机太阳能电池；柔性电极；大面积；刮刀涂布

参考文献

- [1] Zeng G.; Chen W.; Chen X.; Hu Y.; Chen Y.; Zhang B.; Chen H.; Sun W.; Shen Y.; Li Y.*; Yan F.; Li Y. *J. Am. Chem. Soc.*, under review.
- [2] Chen, Y.; Wan J.; Xu G.; Wu X.; Li X.; Shen Y.; Yang F.; Ou X.; Li Y.*; Li Y. *Sci. China Chem.* **2022**, accepted.
- [3] Chen H.#; Zhang R.#; Chen X.; Zeng G.; Kobera L.; Abbrent S.; Zhang B.; Chen W.; Xu G.; Oh J.; Kang S.-H.; Chen S.; Yang C.; Brus J.; Hou J.; Gao F*.; Li Y.*; Li Y. *Nat. Energy* **2021**, **6**: 1045.
- [4] Zhang B.; Yang F.; Chen S.*; Chen H.; Zeng G.; Shen Y.; Li Y.*; Li Y. *Adv. Funct. Mater.* under review.

具有增强光敏作用的阴离子型花青 J 聚集纳米粒子，用于线粒体靶向肿瘤光治疗

李奕彬¹, 马腾¹, 蒋皓¹, 李伟², 田迪^{2,*}, 朱锦涛^{2,*}, 李忠安^{1,*}

¹湖北省生物材料与医用防护材料工程研究中心, 能源转换与存储材料化学教育部重点实验室, 化学与化工学院, 华中科技大学, 武汉, 430074

²湖北省生物质纤维与生态染整重点实验室, 化学与化工学院, 武汉纺织大学, 武汉, 430073

*Email: dtian@wtu.edu.cn, jtzhu@hust.edu.cn, lizha@hust.edu.cn

阳离子花青已被广泛用作生物医学领域的光敏剂, 但其单线态氧生成效率低、稳定性差, 易被免疫系统捕获, 导致光动力治疗效果不佳。另外, 花青分子具有较强的聚集倾向, 但控制其在纳米胶束中的聚集行为面临巨大挑战, 且聚集行为对光敏化到影响尚不明晰。

本文基于强吸电子基团三氰基咪喃端基, 结合阳离子结构调控, 构建了一类新型的阴离子花青光敏剂 (C3T-X)。与阳离子花青相比, 阴离子花青具有红移的吸收光谱以及更好的光稳定性。以正十二烷基三苯基磷 (PC) 作为阴离子花青的对离子, 不仅赋予了其线粒体靶向能力, 还使其在水相和纳米粒子中实现了有序 J-聚集组装。与非聚集体相比, J-聚集体不仅表现出大幅红移的吸收和发射光谱, 还有效降低了单线态-三线态能级差, 促进系间穿越, 显著增强了单线态氧生成效率 (提升了 5 倍), 媲美商用 Ce6 光敏剂。基于 C3T-Pc 的 J-聚集纳米胶束的单线态氧生成效率更进一步提高到 12 倍, 在癌症光动力疗法上取得了优异的疗效。

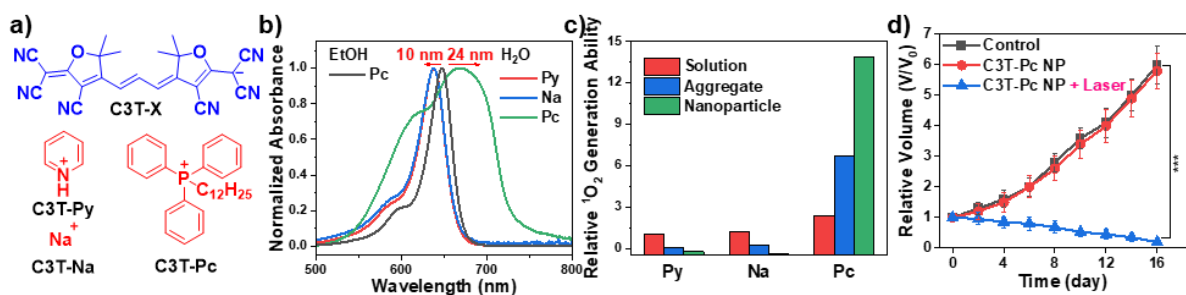


Fig. 1 a) Structure of anionic cyaines of C3T-Xs. b) Normalized UV-vis absorption spectra of 5 μ M C3T-Xs in pure EtOH and EtOH:H₂O=1:99. c) Relative ¹O₂ generation ability of C3T-Xs (v.s. Py Solution, detected by SOSG). d) Time-dependent relative tumor growth curves for the different groups.

关键词: 菁染料; J聚集; 纳米胶束; 光动力治疗

参考文献

[1] Li, Y.; Ma, T.; Jiang H.; Li W.; Tian D.;Zhu, J.; Li Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61**, e202203093.

稳定的“给体-受体”型有机自由基半导体的设计、合成与应用研究

李远

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室，广州，510641

*Email: celiy@scut.edu.cn

自 2000 年诺贝尔化学奖被授予导电聚合物发现以来，有机半导体光电材料在有机发光二极管 (OLEDs)、有机光伏 (OPVs)、有机场效应晶体管 (OFETs)、有机光探测器 (OPDs) 等领域展示出巨大的应用前景，其中 OLED 已经实现了产业化应用，而其他技术的应用研究还任重道远。

关于有机半导体材料和器件的基础理论较为丰富，然而基于新原理开发新颖的有机光电材料依然是当前该领域的重点和热点。在过去 20 多年的研究中，研究者对有机半导体的激发态和光物理过程展开了大量的研究和探索，而对其电子基态的探究相对较少。^[1]在有机半导体中，“窄带隙有机半导体”在 OPV、OFETs 和 OPDs 等领域扮演着重要角色，而经典的“给体-受体”结构 (D-A) 设计是实现窄带隙有机半导体的最为重要和有效的途径。本报告将介绍我们在稳定的 D-A 型自由基半导体的设计和合成的最新进展，并深入探讨其电子自旋基态 (Fig. 1)、^[2]及其在有机光电、钙钛矿、光热转换等前沿领域的应用潜力。^[3-4]

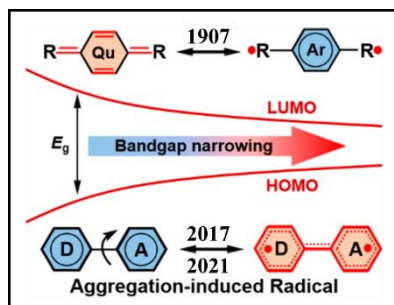


Fig. 1 Derived from 1907 "open-shell diradical" resonance formula (top); The classic "donor-acceptor" type diradical resonance formula reported by our research group in 2017 and 2021 (below)

关键词： 自由基；电子自旋；基态；有机半导体；聚集诱导自由基

参考文献

- [1] Zhongxin Chen, **Yuan Li**, * Fei Huang. *. *Chem*, 2020, 7, 288-332.
- [2] Tianqi Niu, Weiya Zhu, Yiheng Zhang, Qifan Xue,* Xuechen Jiao, Zijie Wang, Yue-Min Xie, Ping Li, Runfeng Chen, Fei Huang, **Yuan Li**,* Hin-Lap Yip,* Yong Cao. *Joule*, 2021, 5(1), 249-269.
- [3] Miao Zeng, Xiaojing Wang, Ruijie Ma, Weiya Zhu, **Yuan Li**,* Zhongxin Chen, Jiawen Zhou, Wenqiang Li, Tao Liu,* Zhicai He,* He Yan, Fei Huang,* Yong Cao. *Adv. Energy Mater.*, 2020, 25(10), 2000743.
- [4] Chao Chen, Zhongxin Chen, Dongdong Liu, Pinjuan Zou, Gang Wang, **Yuan Li**,* Xunhui Xiong*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 51(60), 26718-26724.

从单个分子到分子聚集态科学

李振

¹ 武汉大学化学与分子科学学院, 武汉, 430072

² 天津大学分子聚集态科学研究院, 天津, 300072

*Email: lizhen@whu.edu.cn

科学的研究遵循由简至繁、自浅入深的探索历程, 变化的分子结构缤纷了万千世界, 炫酷的发光现象璀璨了衣食住行。一滴滴水珠融入大海, 一个个分子汇聚成材, 群体与个体相互关联, 当分子排列牵引了堆积方式, 分子聚集态行为随之呈现出可能的梦幻性能。

本报告将通过有机力致发光、有机室温磷光等典型实例, 展现分子聚集态的奇妙发光行为。

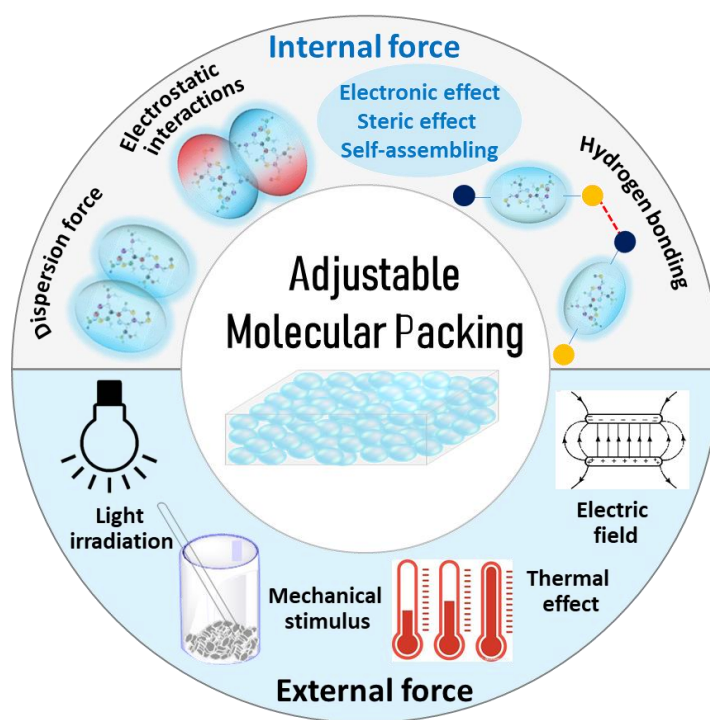


图1. 分子聚集态的调控方式与内部机制

关键词: 分子聚集态; 堆积模式; 有机室温磷光; 有机力致发光; 生物成像

参考文献

[1] Li, Q.; Li, Z. *Acc. Chem. Res.* **2020**, 53: 962.

[2] Xie, Y.; Li, Z. *Chem* **2018**, 4: 943.

[3] Wang, C.; Yu, Y.; Yuan, Y.; Ren, C.; Liao, Q.; Wang, J.; Chai, Z.; Li, Q.; Li, Z. *Matter* **2020**, 2: 181.

荧蒽功能分子设计合成及性能研究

李忠安*

¹ 华中科技大学化学与化工学院, 湖北武汉, 430074

*Email: lizha@hust.edu.cn

荧蒽是一种典型的非交替稠环芳烃, 具有平面性高、化学稳定性好等特点。其中心五元环呈缺电子特征, 因此非常适合用来构筑电子受体单元。然而, 荧蒽分子功能化在化学方面还存在较大的挑战。我们近来以二苯并富烯为原料, 通过简单的Diels-Alder加成反应构建了一种新的2,3-二氰基荧蒽电子受体单元, 进而制备了系列高效、稳定有机非掺杂空穴传输材料。进一步地, 以9-羟基芴和马来酰亚胺为原料通过简单的一锅法合成了一种新的2,3-酰亚胺荧蒽受体单元, 并通过控制反应条件合成了两类不同酰亚胺朝向的立构规整小分子**F1-F4**, 在没有修饰任何AIE活性单元的情况下表现出明显的聚集诱导发光效应。**F1**和**F3**表现出明显的P型半导体性质, 但**F3**的最大空穴迁移率达到了 $0.026 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 是**F1** ($3.03 \times 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) 的 10^4 倍, 表明立构规整结构的重要性。另外, 噻吩桥上引入F原子则可以使得**F2**和**F4**表现出N型半导体性质。上述结果表明2,3-酰亚胺荧蒽是一种极具潜力的构建兼具高载流子迁移率和高固体荧光效率有机半导体材料分子砌块。

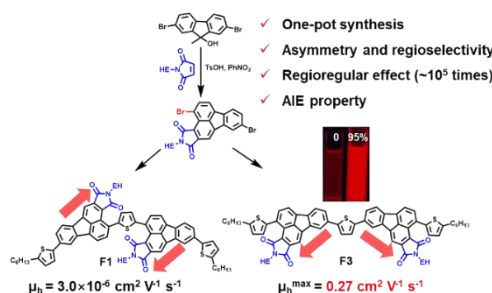


Fig. 1 Regioregular fluoranthene imide based semiconductors

关键词: 有机半导体; 荧蒽; 立构规整性

参考文献

- [1] Sun, X.; Liao, M.-Y.; Yu, X.; Wu, Y.-S.; Zhong, C.; Chueh, C.-C.; Li, Z.; Li, Z. A. *Chem. Sci.* **2022**, *13*: 996.
- [2] Yu, X. Y.; Li, Z.; Sun, X. L.; Zhong, C.; Zhu, Z. L.; Li, Z. A.; Jen, A. K. Y. *Nano Energy* **2021**, *82*: 105701.
- [3] Li, Y. X.; Sun, X. L.; Zhang, X. N.; Zhang, D. Y.; Xia, H. R.; Zhou, J. Y.; Ahmad, N.; Leng, X. Y.; Yang, S.; Zhang, Y.; Li, Z. A.; Zhou, H. Q. *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*: 2676.
- [4] Sun, X.; Wu, F.; Zhong, C.; Zhu, L.; Li, Z. A. *Chem. Sci.* **2019**, *10*: 6899.
- [5] Sun, X.; Xue, Q.; Zhu, Z.; Xiao, Q.; Jiang, K.; Yip, H. L.; Yan, H.; Li, Z. A. *Chem. Sci.* **2018**, *9*: 2698.

高性能 OLED 材料、器件及制造装备

廖良生

苏州大学功能纳米与软物质研究院，江苏省苏州市仁爱路 199 号，215123

lsiao@suda.edu.cn

有机发光二极管（OLED）技术，正在显示和领域形成上万亿元的全球市场，属我国战略性新兴产业重点发展方向之一，也是中日韩欧美相互竞争的产业制高点之一。为提高我国 OLED 技术及产业全球竞争力，研究和开发高性能 OLED 材料与器件、设计制造正被“卡脖子”的国产 OLED 生产线，至关重要。

（1）材料：从有机分子基本结构原理出发，通过分子设计与位点调控，不仅发明了高效稳定并具实用价值的 OLED 发光材料，而且突破能隙定律限制，将 OLED 材料研究拓展到了近红外光通讯领域。（2）器件：将无机半导体的“掺杂 p-n 结”概念引入有机半导体材料中，通过材料掺杂改性，发明了高效率长寿命叠层（tandem）OLED。该叠层技术已经为全球 OLED 电视和照明厂商创造了数百亿美元销售额。（3）装备：为打破国外 OLED 装备垄断，主持设计制造了首条国产 G2.5 代 OLED 生产线，性能达到国际先进水平。

利用上述研发成果，成功建立了 OLED 自主产业链，生产了高性能 OLED 健康照明光源和用于国土安全的硅基 OLED 微显示器等产品。

关键词： OLED；发光材料；器件结构；蒸镀生产线

有机低维晶体激光及光子性质调控

廖清 1,*

¹首都师范大学, 北京市海淀区西三环北路 105 号, 100048

*Email: liaoqing@cnu.edu.cn

有机半导体材料因其高光学增益、分子可裁剪、光学性质易调谐、可柔性集成等优势, 在有机固态激光和分子光子学领域展现了重要的应用潜力¹⁻³。然而, 电泵浦有机固态激光仍然是该领域的重要挑战之一。针对电泵浦有机固态激光中的关键问题, 我们设计合成了兼具高迁移率和高发光效率的有机激光增益材料; 发展基于TADF机制的有机激光材料解决三线态激子利用效率的问题; 利用光学微腔限域光场的作用, 增强光与物质的相互作用, 从而实现激子极化激元激光, 来降低激光泵浦阈值; 利用有机低维晶体微腔中的拓扑光子学性质, 发展圆偏振拓扑激子极化激元激光。

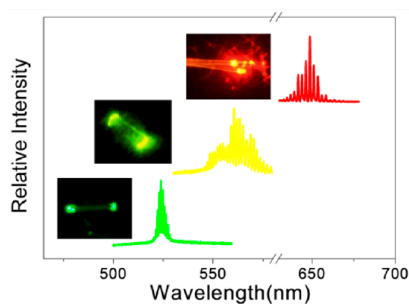


Fig. 1 Organic pure single-crystalline TADF laser

关键词: 有机半导体材料; 有机激光; 圆偏振激光

参考文献

- [1] Ren, J.H.; Liao, Q.*; Li, F.*; et al. *Nat. Commun.* **2021**, **12**: 689.
- [2] Han, X.X.; Lei, Y.L.*; Liao, Q.*; et al. *Angew Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 3037.
- [3] Ren, J.H.; Liao, Q.*; Huang, H.; et al. *Nano Lett.* **2020**, **20**: 7550.

有机光伏催化析氢

林禹泽

中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街2号，100190

*Email: linyz@iccas.ac.cn

氢能具有能量密度高，无污染，无碳排放等优势。有机共轭分子因易功能化修饰，能带结构易调控等优势，使其在光催化析氢领域具有巨大的应用潜力。然而，有机半导体缺陷态密度通常较高 (10^{16} - 10^{18} cm^{-3})，载流子复合较为严重，是限制其光催化析氢效率的重要因素之一。相对于传统的线性分子，二维共轭分子通过扩展共轭面积，增强分子间相互作用，降低结构无序度和缺陷态密度。在这项研究中，我们通过二维扩展稠环分子的共轭程度合成了低缺陷态密度的有机光伏分子 (TPP)，将有机光伏材料的缺陷态密度降低至 $2.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，这是明显低于线性对比分子 Y6 ($1.1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$)，相比其他经典的有机光伏半导体缺陷态密度低 1-3 个数量级。PM6:TPP 异质结纳米颗粒 ($72.75 \text{ mmol h}^{-1} \text{ g}^{-1}$) 较 PM6:Y6 纳米颗粒 ($62.67 \text{ mmol h}^{-1} \text{ g}^{-1}$) 表现出更快的产氢速率，比经典的 TiO_2 和 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 光催化剂高出 2-3 个数量级。这一结果表明通过设计二维共轭分子降低缺陷态密度能够促进有机半导体光催化析氢的速率的提升。

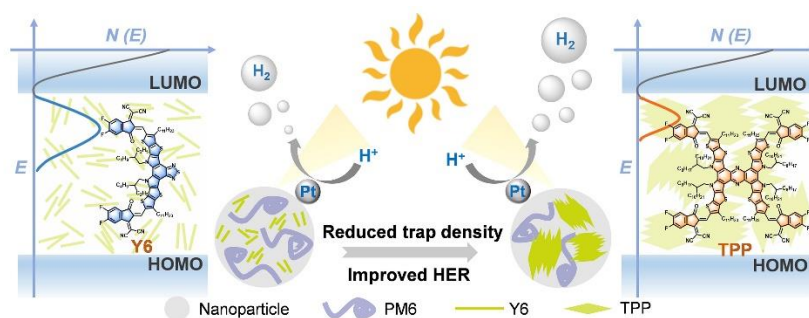


Fig. 1 The diagram of the motivation.

关键词： 有机光伏；光催化；析氢；异质结；缺陷态

参考文献

[1] Zhang, Z.; Si, W.; Wu, B.; Wang, W.; Li, Y.; Ma, W.; Lin, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202114234.

功能复合材料的跨界面热输运机制研究

林悦^{1,2*}, James Patrick Male², Ramya Gurunathan², 孙彦东^{2,3}, Jeffrey Snyder²

¹中国科学院福建物质结构研究所, 福建省福州市鼓楼区杨桥西路 155 号, 350002

²Department of Materials Science and Engineering, Northwestern University, Evanston, IL60208, USA

³中国工程物理研究院, 北京市海淀区花园路 6 号, 100088

*Email: linyue@fjirsm.ac.cn

散热是维持微纳级功率器件、光电器件的性能和可靠性的关键因素[1]。为实现高效调控, 正确理解微观界面结构对材料/器件热导率的影响机制至关重要。长期以来, 界面散射被认为是降低复合材料以及异质界面器件热导率的唯一因素[2]。通过对碲化铅-石墨烯复合材料以及其他17种复合材料的研究, 我们发现异质材料界面能使声子速度 (v_s) 得到一定程度的下降, 从而大幅度降低热导率 ($\kappa_L \propto v_s^3$)。例如, 在碲化铅材料中加入1.47 vol.%石墨烯, 观测到声子速度下降了11%, 导致29.7%的晶格热导率下降。基于有效介质理论, 我们发展了一个无拟合参数模型, 仅通过材料的密度和模量就可以预测界面对热导率的影响。该工作提出了通过异质界面调控能源材料、微纳电子器件、以及纳米热输运的新机制。

关键词: 界面声子输运; 热导率调控; 热管理

参考文献

[1] Moore, A. L.; Shi, L.; *Materials Today* **2014**, 17(4): 163.

[2] Chen, Z. W.; Zhang, X. Y.; Pei Y. Z., *Adv Mater* **2018**, 30, 1705617.

Investigation Ferrocene Derivatives in 2D Material Contacted Single Molecular Junction

Chang Liu (刘畅)^{1,2}, Li Yang*

¹Department of Chemistry, Xi'an-Jiaotong Liverpool University, Suzhou, 215123, China

²Department of Chemistry, University of Liverpool, Liverpool, L69 7ZD, UK.

*Email: Chang.Liu1906@xjtlu.edu.cn

Monomolecular electronics, which studies the charge transport properties of various monomolecular systems, has vastly increased in popularity over the last decade. This topic focuses on the molecular scale of single molecular conductance and electron transfer at room temperature. To the best of our knowledge, previous studies lack measurements of the conductance of individual ferrocene derivatives at room temperature ionic liquid media. It is a novel study to evaluate the conductance of molecular junction formed by 2D structure and 4,5-Dihydro-4-phenyl-2-oxazolyl]ferrocene. Single molecular conductance measurements were obtained using a scanning tunneling microscopy (STM), in particular the current distance $I(s)$ technique and break junction BJ technique, which is ideal for two-dimensional structures such as gold and graphene to ensure the integrity of the material while measuring.

Keywords: 2D Material, STM technique, Ferrocene

有机场效应薄膜器件集成的模型与实验

刘川

光电材料与技术国家重点实验室和电子与信息工程学院，中山大学，510006

*Email: liuchuan5@mail.sysu.edu.cn

前沿研究探索了许多种新的器件结构和异质集成方案，包括具有非传统栅极结构有机场效应薄膜晶体管，以及晶体管与光电二极管、LED 等的混合集成器件，从而将传感、存储、计算和照明等功能结合起来。但是材料组合的无数可能性和复杂的能级弯曲，导致理解这些器件比较困难，需要复杂和特殊的模型。由于缺乏一个简明的物理图像和一个通用的框架，对它们的传导机制和电流电压关系的理解和建模相当复杂。

在器件模型上，我们探讨了电荷载流子的积累、注入、跃迁和弛豫的耦合效应，以及通道间的相互限制，并将其总结成一幅简洁的物理图像。然后导出了适用于一般半导体的简化统一解。该图像同时解释和描述了开态器件的电流-电压关系、电流饱和、沟道电位、漂移场、载流子速度等物理量的演化。并通过对有机半导体、低维半导体等材料的单一器件和集成器件的模拟和实验，得到了初步的验证。利用这个物理图像，有助于我们通过几秒钟内的简单计算，阐明这些器件的工作机理、进行特性分析、预测器件性能和根据需求设计器件结构。在器件实验上，我们构建了不同耦合方式的器件集成，验证了上述器件模型，并且在场效应光探测器件中，获得了高增益和高响应速度的组合，为解决快速探测和大增益矛盾提供了新的途径。

关键词：场效应薄膜晶体管；器件模型；集成探测器件；

参考文献

- [1] Yuanzhe Li, Guowei Chen, Shenghe Zhao, Chuan Liu*, Ni Zhao*, Addressing gain-bandwidth trade-off by a monolithically integrated photovoltaic transistor, *Science Advances*, 2022, 8: eabq0187.
- [2] Chuan Liu,* Xiaojie Li, Yiyang Luo, Ya Wang, Sujuan Hu, Chenning Liu, Hang Zhou, Jun Chen, Juncong She, Shaozhi Deng, How Materials and Device Factors Determine the Performance: A Unified Solution for Transistors with Nontrivial Gates and Transistor-Diode Hybrid Integration, *Advanced Science*, 2021, 2104896.

基于芴的高迁移率发光有机半导体材料和器件

刘单¹, 德健博³, 付红兵³, 董焕丽^{1,*}, 胡文平²

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

²天津大学, 天津市南开区卫津路92号, 300072

³首都师范大学, 北京市海淀区西三环北路105号, 100048

*Email: dhl522@iccas.ac.cn

有机发光晶体管 (OLET) 同时集成了OLED发光显示功能和OFET调控放大功能, 可以有效简化显示器件像素单元的驱动电路, 是下一代变革性柔性显示的重要器件基元, 有望推动其在相关领域的应用^[1]。但是, 自2003年OLET器件被报道以来, 效率普遍偏低, 因为高迁移率和强发光很难在同一分子中有效集成, 其设计合成面临巨大挑战。在前期研究中发现, 通过对核心结构基元进行合理的共轭体系拓展, 可实现二者的有效集成^[2]。因此, 我们选择发光性能优异的芴为结构基元, 利用碳-碳单键在芴的2,7位引入苯环、萘环拓展分子共轭结构, 设计合成了兼具电荷传输性能和强发光的2,7-二苯基芴和2,7-二萘基芴分子 (Fig. 1), 均展现了优异的高迁移率发光特性, 最高载流子迁移率为 $7.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 最高PLQY为80%, 并且, 以2,7-二苯基芴的微纳米线晶体为OLET的活性层, 实现了单根晶体的深蓝色电致发光, 以2,7-二苯基芴薄膜为活性层构筑了垂直OLET器件, 实现了栅压调控和强的面光源发光^[3-5]。

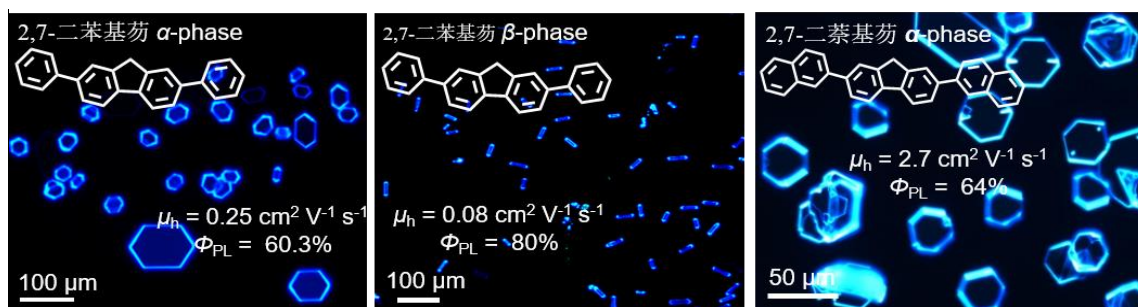


Fig. 1 Chemical structure of molecules and their fluorescent images.

关键词: 有机半导体材料; 高迁移率; 强固态发光; 有机发光晶体管

参考文献

- [1] Qin, Z.; Gao, H.; Dong, H.; Hu, W.; *Adv. Mater.* **2021**, *33*; 2007149.
- [2] Liu, J.; Zhang, H.; Dong, H.; Hu, W.; Heeger, A. *Nat. Commun.* **2015**, *6*: 10032.
- [3] Liu, D.; De, J.; Fu, H.; Dong, H.; Hu, W.; *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 6332.
- [4] Liu, D.; Gao, H.; Dong, H.; Hu, W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*: 20274.
- [5] Liu, D.; Wu, X.; Hu, W.; Dong, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202200791.

具有自调控效应的非富勒烯受体材料及高性能有机太阳能电池

刘峰^{1,2}, 朱晓张^{1,*}

¹ 中国科学院化学研究所, 北京, 100190

² 山西大学化学化工学院, 太原, 030006

*Email: xzzhu@iccas.ac.cn

有机太阳能电池因其质轻、柔性、半透明及可大面积卷对卷印刷制备等自身优势, 有望在高附加值的建筑一体化方面广泛应用。近年来, 新型非富勒烯受体材料 (NFAs) 的快速发展推动有机太阳能电池实现了优异的光伏性能 (>19%)。在D/A共混体系中, NFAs在固态条件下的聚集行为主要是由分子骨架间 π - π 堆积和侧链相互作用引起的, 对共混薄膜的相分离形貌起着重要作用, 从而影响器件光伏性能。我们提出通过自调控效应设计非富勒烯受体材料新策略, 调节分子间堆积模式及固态聚集行为。通过在Y6骨架的 sp^2 -N上引入芳基烷基支链合成了非富勒烯受体材料Z9。Z9通过苯基-苯基间的 π - π 堆积和苯基-IC末端相互作用控制分子间堆积模式。这种自调控效应使Z9具有新的 π - π 堆积行为, 并通过长程超交换电子耦合形成高效的三维电荷传输通道。Z9与D18展示出良好的混溶性, 并在共混薄膜中形成有利的分子堆积和相分离尺寸, 促进电荷的解离、传输和收集。基于Z9的二元和三元光伏器件分别获得了18.6%和19.0%的光电转换效率。

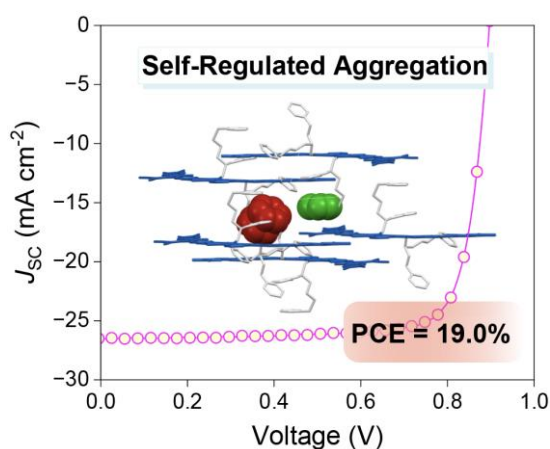


Fig. 1 非富勒烯受体Z9晶体堆积模式及光伏性能

关键词: 有机太阳能电池; 非富勒烯受体; 分子聚集行为

参考文献

- [1] Yuan, J.; Zhang, Y.; Zhou, L.; Zhang, G.; Yip, H.-L.; Lau, T.-K.; Lu, X.; Zhu, C.; Peng, H.; Johnson, P. A.; Leclerc, M.; Cao, Y.; Ulanski, J.; Li, Y.; Zou, Y. *Joule* **2019**, *3*, 1140.
- [2] Liu, F.; Zhou, L.; Liu, W.; Zhou, Z.; Yue, Q.; Zheng, W.; Sun, R.; Liu, W.; Xu, S.; Fan, H.; Feng, L.; Yi, Y.; Zhang, W.; Zhu, X. *Adv. Mater.* **2021**, *33*, 2100830.
- [3] Liu, F.; Jiang, Y.; Xu, R.; Su, W.; Wang, S.; Zhang, Y.; Liu, K.; Xu, S.; Zhang, W.; Yi, Y.; Ma, W.; Zhu, X. **2023**, *Submitted*.

高效率双纤维有机薄膜光伏电池

刘烽^{1,*}, 朱磊¹, 张明^{1,*}

¹上海交通大学化学化工学院, 上海市东川路 800 号, 200430

*Email: fengliu82@sjtu.edu.cn

有机光伏电池薄膜给受体之间的共混与相分离会形成多尺度相分离形貌, 对有机薄膜光伏器件性能起着决定性作用。通过制膜工艺、后处理手段的调节, 联合给受体材料本身的物理化学特性, 制备高结晶性双纤维形貌, 提升激子解离效率与电荷传输性质, 是提高有机光伏薄膜器件效率的有效途径。本研究从材料结晶与共混的基本条件出发, 从溶液结晶过程调控与冷结晶过程调控两条主线开展研究, 细致探索了双纤维多尺度形貌的形成过程与器件性能的相互关系, 并且对调节给受体结晶行为提出共性方法, 有效的指导了形貌的调控和高效率器件的制备。结合非平衡态多尺度形貌特点, 构建了器件形貌与物理过程模型, 全面理解有机薄膜光伏电池的光电转换过程机制。

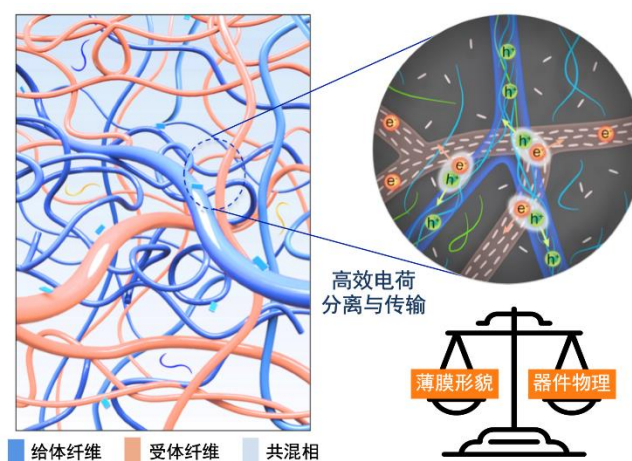


Fig. 1 双纤维形貌与器件功能

关键词: 有机光伏; 形貌调控; 双纤维; 光电转换效率

参考文献

- [1] Zhang M, Zhu L, ... Liu F*, , *Adv. Matter.* **2021**, 2007177.
- [2] Wang Z, Gao K*, Jen A*, ... Liu F*, *Nature. Commun.* **2021**, s41467-020-20515-3.
- [3] Zhang M, Zhu L, ... Liu F*, *Nature. Commun.* **2021**, s41467-020-20580-8.
- [4] Zhu L, Zhang M, ... Liu F*, *Adv. Energy Matter.* **2020**, 10, 1904234.

超低功耗的人工神经突触器件

刘国才^{1,2}, 郭云龙^{1,2*}, 刘云圻^{1,2*}

¹, 中国科学院化学研究所, 100190

² 中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: liuguocai@iccas.ac.cn

受生物启发的电子器件在人工智能和类脑科学领域显示出巨大的潜力, 低能耗和多功能是其应用的关键因素。而目前所报道的相关器件, 操作电压较大, 并且功能模拟很单一。为此我们在本课题中开发了基于离子栅垂直有机场效应晶体管的人工突触和神经网络。为了降低操作电压我们通过交联策略, 搭建了垂直有机晶体管, 其沟道长度缩小到30 nm; 同时选用离子液体为栅电解质, 在栅电压下离子液体中的离子会向半导体界面处移动并形成双电层; 得益于超短的沟道长度和在电解质-沟道界面巨大的电容值, 所制备的电子器件在栅压、源漏电压分别为1 mV、0.1 mV下即可工作, 最小功耗降低至0.06 fJ, 这比生物体突触所需的功耗(1–10 fJ)更低。此外, 我们还构建了5×5的突触阵列, 用于图像学习和记忆, 模拟时空信息处理和听声辨位功能, 并设计出可以辨别酸度的人工舌头, 赋予了其集大脑学习记忆、听声辨位、味觉识别为一体的超低功耗、多功能器件。

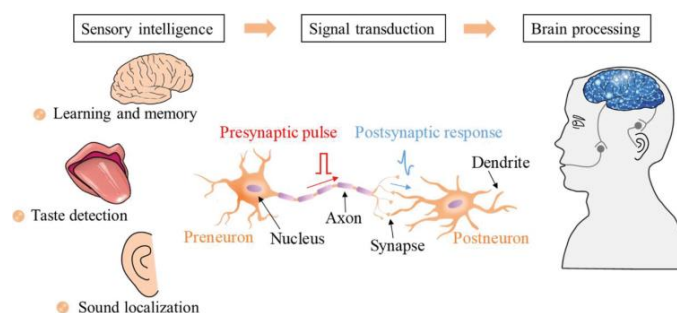


Fig. 1 Sensation and processing of stimuli by a sensory organ

关键词: 人工突触; 感知功能; 电解质栅

参考文献

[1] Liu, G., Li, Q., Shi, W., et al. *Advanced Functional Materials* **2022**, **32**: 10.

硼氮配位键 n 型有机小分子

刘俊*

中国科学院长春应用化学研究所，高分子物理与化学国家重点实验室，长春，130022

*Email: liujun@ciac.ac.cn

不同于无机半导体，有机高分子半导体的分子间作用力弱，因此具有易加工、柔性的突出优势，在显示、照明、信息、能源、健康等领域应用前景光明。p 型和 n 型有机高分子半导体都是有机电器件的核心材料，而 n 型有机高分子半导体的数量远远少于 p 型。针对该瓶颈问题，有别于采用酰胺结构、强拉电子取代基、氮杂原子等设计 n 型有机高分子半导体的传统思路，我们提出了采用硼氮配位键设计 n 型有机高分子半导体的策略，并在高分子和有机小分子两类体系上予以成功实施。本报告将主要介绍我们在硼氮配位键 n 型有机小分子方面的近期研究进展，包括两方面内容。1) 面向有机太阳能电池中太阳光吸收的问题，发展出硼氮配位键有机小分子电子受体材料，具有宽吸收光谱特征，其吸收光谱半峰宽达到 280 nm, 有机太阳能电池能量转换效率 7%。^[1] 2) 为了深入揭示硼氮配位键对于 π 共轭体系电子结构和光电性质的影响，发展出硼氮配位键稠环有机小分子半导体，其 LUMO 能级低至 -4.5 eV，接近空气稳定的极限，电子迁移率达到 $1.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。^[2,3]

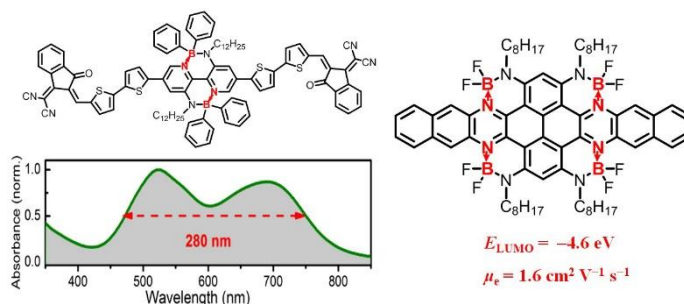


Fig. 1 Organic molecules based on B←N units with wide absorption spectra or with high electron mobility

关键词： 硼氮配位键；n型有机半导体；电子受体；有机光伏器件

参考文献

- [1] Liu, F.; Ding, Z. C.; Liu*, J.; Wang, L. X. *Chem. Comm.* **2017**, *53*: 12213.
- [2] Min, Y.; Dou*, C. D.; Tian, H. K.; Geng, Y. H.; Liu*, J.; Wang, L. X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*: 2000.
- [3] Min, Y.; Dou*, C. D.; Liu, D.; Dong*, H. L.; Liu*, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*: 17015.

无定形 n 型高分子半导体

曹旭, 邓思辉, 刘俊*

中国科学院长春应用化学研究所, 高分子物理与化学国家重点实验室, 长春, 130022

*Email: liujun@ciac.ac.cn

n型高分子半导体是印刷有机集成电路的核心材料, 其薄膜的均一性问题是商业化应用的瓶颈之一。已有的高性能n型高分子半导体都是半结晶性的, 其薄膜中不同区域的结晶度不一致, 导致电子迁移率不一致, 薄膜的均一性差。实现优异的均一性, 需要发展高电子迁移率的无定形n型高分子半导体, 但是这类材料目前还没有文献报道, 其分子设计策略完全未知。我们前期提出了采用硼氮配位键设计n型有机半导体的策略, 并在高分子和有机小分子两类体系上予以成功实施, 发展出硼氮配位键n型有机小分子半导体材料和硼氮配位键n型高分子半导体材料。本报告旨在介绍我们在硼氮配位键n型高分子半导体的基础上, 开发n型无定形高分子半导体方面的近期研究进展。

首先, 我们提出, 增加共轭高分子主链的刚性, 是减弱高分子的结晶性, 发展无定形共轭高分子的有效途径; 然后, 我们设计并合成具有极强刚性的由两种缺电子单元构成的高分子主链, 开发具有高电子迁移率的无定形n-型高分子半导体, 基于该无定形高分子薄膜的n型有机场效应晶体管电子迁移率达到 $0.34 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$; 进一步的, 为了提高n型有机场效应晶体管器件的稳定性, 我们通过高分子的侧链工程, 降低了高分子的LUMO能级, 实现了优异的器件空气稳定性。此外, 我们还验证了减弱共轭高分子主链的刚性, 可以实现高结晶性n型高分子半导体。

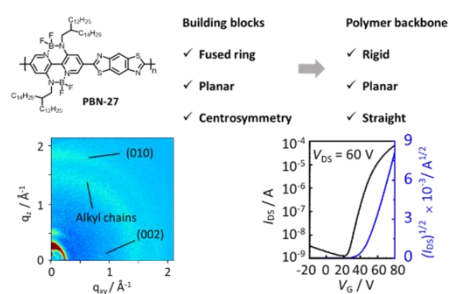


Fig. 1 Amorphous n-type conjugated polymer with high electron mobility

关键词: 无定形; 刚性骨架; n型高分子半导体; 有机场效应晶体管

参考文献

- [1] Miao, J.; Li, H.; Wang, T.; Han, Y.; Liu, J.; Wang, L. *J. Mater. Chem. A*, **2020**, *8*: 20998
- [2] Cao, X.; Li, H.; Hu, J.; Tian, H.; Han, Y.; Meng, B.; Liu, J.; Wang, L. *Angew. Chem.Int. Ed.* **2023**, *62*: e202212979
- [3] Deng, S.; Dong, C.; Liu, J.; Meng, B.; Hu, J.; Min, Y.; Tian, H.; Liu, J.; Wang, L. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**: e202216049

聚集抑制的混合策略实现高性能有机-量子点复合太阳能电池

刘俊伟¹, 王婧婧¹, 叶龙^{1,*}

¹天津大学, 天津市津南区雅观路 135 号, 300350

*Email: yelong@tju.edu.cn

溶液基有机-胶体量子点 (CQD) 复合太阳能电池在过去十年中引起了广泛关注。然而, 基于直接合成CQD油墨的复合太阳能电池仍有待开发。我们提出了一种简单的聚合物共混策略, 利用具有精细优化聚集行为的共轭聚合物共混, 将直接合成的CQD/聚合物复合太阳能电池效率首次提高到13%。载流子传输和复合的光谱和电学研究表明, 与单一聚合物相比, 聚合物共混具有更快的载流子传输和更少的复合。此外, 混合策略为较高聚集倾向的聚合物提供了“稀释效应”, 保证了适中的特征尺寸和表面粗糙度, 从而加速载流子传输, 取得较高的光伏性能。基于以上研究, 我们建立了聚合物形貌、载流子传输和光伏性能之间的关系, 进而推动CQD/聚合物复合太阳能电池的发展。

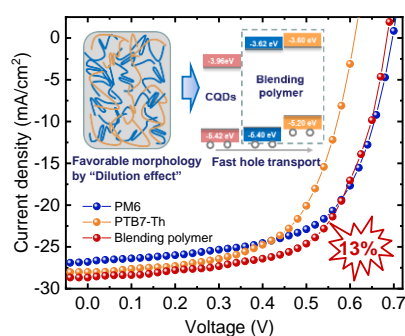


Fig. 1 Aggregation-suppressed polymer blending strategy enables high-performance hybrid solar cells

关键词: 复合太阳能电池; 光伏聚合物; 聚合物共混策略; 胶体量子点

Molecular Orientation-Induced Polarization Filtering based on Organic Heterostructures

Kun Liu (刘坤)¹, Jianbo De², Qing Liang², Qing Liao^{2,*}, Hongbing Fu^{1,2,*}

¹Institute of Molecule Plus, Tianjin University, Tianjin, 300072

²Beijing Key Laboratory for Optical Materials and Photonic Devices, Department of Chemistry, Capital Normal University, Beijing 100048

*Email: hongbing.fu@tju.edu.cn

It is a great challenge to demonstrate the efficient polarization-signal filtering induced by molecular orientation in organic heterostructures. Herein, we develop a sequential assembly strategy to build the epitaxially aligned branched nanowire (NW)-nanosheet (NS) heterostructures (BWSHs) comprising blue-emissive horizontal p-distyrylbenzene (DSB) NS arrays on 9,10-dicyanoanthracene (DCA)-dominated (DCA)_{1-x}(DSB)_x doped NW backbone. It is shown that the DSB NS arrays generate blue amplified spontaneous emission (ASE), which can effectively propagate in (DCA)_{1-x}(DSB)_x backbone with yellow emission immunity to DCA absorption and realize polarization filtering of output ASE. This molecular orientation-induced polarized-light transport can serve to control light propagation and function as polarization filter in a single heterostructure. The research provides an interesting example for the exploration of novel all-optical switch devices in photonic circuits.

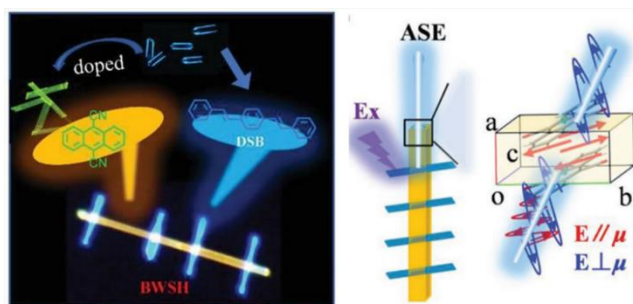


Fig. 1 Schematic diagram of polarization-signal filtering in a single heterostructure.

Keywords: amplified spontaneous emission, branched nanowire-nanosheet heterostructures, self-assembling, transition dipole moment, polarization filtering

Reference

- [1] Liu, K.; De, J. B.; Liang, Q.; Liao, Q.; Fu, H. B. *Adv. Optical Mater.* **2022**, 2200776
 [2] Liu, K.; Lei, Y. L.; Fu, H. B. *Chem. Mater.* **2020**, **32**, 5162.

高性能锡基钙钛矿光电探测器用于心率检测

刘天华¹, 王军方¹, 孟祥悦^{1*}

¹中国科学院大学 北京怀柔

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

高效的光探测是现代科学技术的核心, 红外光因其对人体组织具有一定的透射能力同时能够保障使用者人身安全, 适合用来发展无创式健康监测技术。目前的近红外光电探测器主要基于晶体型无机元素半导体的光电二极管, 如硅, 或III-V半导体等材料。溶液法制备的半导体光电探测器, 由于成本低, 成为下一代近红外光传感的候选者。其中, 钙钛矿材料由于溶液法制备、可调的光电特性、与柔性衬底兼容等优点, 成为了近期研究的热点。近红外钙钛矿光电探测器通常使用铅基钙钛矿材料作为光活性层。然而铅基钙钛矿的毒性为其应用带来了一定的限制, 无法应用于室内或者人口密集的城市地区, 所以开发低毒的无铅钙钛矿光电探测器是非常必要的。然而, 报道的近红外锡基钙钛矿光电探测器都存在探测率低的问题, 无法对弱光进行有效的探测。

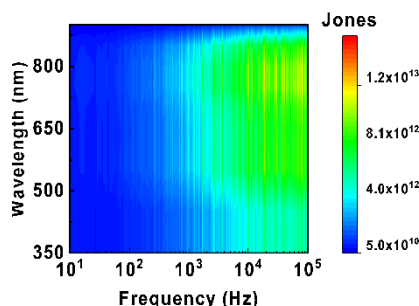


Fig. 1 Tin-based perovskite detectors detectivity

关键词: 锡基钙钛矿; 高性能; 心率检测

参考文献

- [1] Liu T.; Jia Z.; Song Y.; Yu N.; Lin Q.; Li C.; Jia Y.; Chen H.; Wang S.; Wei Y.; Lin Y.; Huang F.; Tang Z.; Li Y.; Meng L.; Huang H. *Adv. Funct. Mater.*, DOI: [10.1002/adfm.202301167](https://doi.org/10.1002/adfm.202301167).
- [2] Meng X*.; Li Y.; Qu Y.; Chen H.; Jiang N.; Li M.; Xue D.; Hu J*.; Huang H*.; Yang S*. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 3693-3698.

印刷制备顶接触有机薄膜晶体管阵列研究

刘旭影 *

郑州大学材料科学与工程学院，郑州市科学大道 100 号，450001

*Email: liuxy@zzu.edu.cn

有机薄膜晶体管 (Organic Thin-Film Transistor, OTFT) 作为重要的电子元器件，其中，大面积 OTFT 器件阵列的制备和集成工艺以及相关的界面物理仍是当前研究的焦点问题。而底栅顶接触的 OTFT 是常见的构型，在制备中可以采取对金半界面的修饰调控电荷注入势垒，从而提高器件性能。真空热蒸镀顶接触电极是主流的金半接触加工工艺。但高温高能的金粒子易造成有机半导体分子薄膜产生化学 (金属化) 和堆积结构的缺陷，诱导形成较深的势阱和界面偶极，导致较高的电荷注入势垒和接触电阻，严重制约 OTFT 器件电学性能提升^{[1] [2]}。

利用具有离子型取代基的共轭聚合物掺杂的 MXene 导电油墨具有可调控的流变性能和宽幅可控的功函数，在印刷柔性 OTFT 器件方面，通过丝网印刷法在半导体薄膜上实现了顶接触电极的高效、高分辨沉积，形成了范德华相互作用的金半接触界面。同时，获得了大面积印刷的 OTFT 阵列 (10 × 10 cm)。所印制的 OTFT 器件呈现出优异的电学性能，其中空穴场效应迁移率超过 10 cm²V⁻¹s⁻¹，高开关比 10⁸，同时拥有低开启电压和较低的亚阈值摆幅。该研究通过印刷法构建了顶接触的 OTFT 阵列，为构建高性能的有机薄膜晶体管器件提供了新途径。

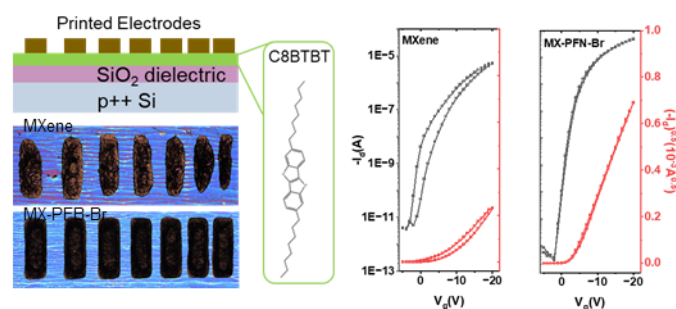


Fig. 1 Printed OTFT arrays with top contacts and the device performance

关键词： 可调功函数导电墨水；有机薄膜晶体管；印刷工艺；顶接触电极；接触电阻

参考文献

- [1] Zhiyun Wu, Shuiren Liu, Zijuan Hao and Xuying Liu, MXenes Contacts Engineering for Printed Electronics, *Advanced Science*, **2023**, DOI: 10.1002/advs.202207174.
- [2] 贾晗钰, 邹晓兰, 孙晴晴, 刘旭影. 全印刷制备有机薄膜晶体管: 进展与挑战. *中国材料进展*, **2021**, **12**: 982.

基于不对称结构的高效红光有机发光二极管

刘艳艳¹, 杨佳吉², 池振国^{1*}

¹ 中山大学, 广东省广州市, 510000

² 华南理工大学, 广东省广州市, 510000

*Email: 973552384@qq.com

本文在之前报道的对称分子TCQ和TPQ的基础上设计合成出具有双电子给体的不对称分子TCPQ。由于对称性打破原则, TCPQ不仅具有最长的发光波长而且具有最高的PLQY。基于TCPQ的OLED在掺杂浓度为10%, 20%和100%时最大EQE分别为21.9% (TCQ:16.9%, TPQ:21.8%), 19.2% (TCQ:15.8%, TPQ:18.5%) 和5.4% (TCQ:2.5%, TPQ:4.9%)。TCPQ高效的电致发光性能证明不对称设计策略在构建长波长TADF-OLED器件方面的潜力。

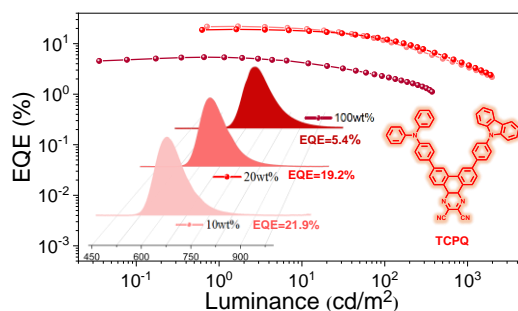


Fig. 1 Molecular structures and OLED characteristics

关键词: 不对称结构; 长波长发光; OLED

参考文献

[1] Liu, Y.; Yang, J.; Mao, Z.; Chen, X.; Yang, Z.; Ge, X.; Peng, X.; Zhao, J.; Su, S. J.; Chi, Z. Asymmetric Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitter for Highly Efficient Red/Near-Infrared Organic Light-Emitting Diodes. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, (14), 33606–33613.

界面设计提升有机太阳能电池性能

刘瑶

化工资源有效利用国家重点实验室, 北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 100029

*Email: liuyao@mail.buct.edu.cn

有机电子器件以质轻、柔性、可溶液大面积加工等独特的优点而引起了学术界和产业界的广泛关注。以有机太阳能电池、有机场效应晶体管和有机发光二极管为代表的有机电子器件通常包含复杂的多层结构。调控和优化由金属电极与有机半导体活性层之间所形成的软/硬材料界面是决定器件性能的一个关键因素。在本工作中, 报告人将系统介绍用于有机太阳能电池的阴极界面修饰材料, 包括新型聚合物两性离子和新型聚合物电解质的设计合成及其结构和性能关系的研究。我们将详细介绍如何从分子设计角度实现界面偶极取向和强度的调控, 以及聚合物主链和侧链的调整和优化如何影响其界面修饰性能。这些新型的聚合物界面修饰材料被置于金属电极和活性层之间, 可以有效的降低界面处的肖特基能垒, 降低金属电极的功函, 增强器件的内建电场, 减少载流子复合损耗, 从而提高电池器件的开路电压、短路电流和填充因子。这一材料构效关系的系统研究对发展新型的活性聚合物界面修饰材料具有重要启示。

关键词: 有机太阳能电池; 界面设计; 界面层; 聚合物界面材料

参考文献

- [1] Page, Z. A.; Liu, Y.; Duzhko, V. V.; Russell, T. P.; Emrick, T. *Science*, **2014**, **346**: 441.
- [2] Liu, Y.; Cole, M. D.; Jiang, Y.; Kim, P. Y.; Nordlund, D.; Emrick, T.; Russell, T. P. *Adv. Mater.* **2018**, **30**: 1705976
- [3] Liu, Y.; Sheri, M.; Cole, M. D.; Emrick, T.; Russell, T. P. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2018**, **57**: 9675.
- [4] Liu, Y.; Sheri, M.; Cole, M. D.; Yu, D. M.; Emrick, T.; Russell, T. P. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2019**, **58**: 5677.
- [5] Liu, M.; Fan, P.; Hu, Q.; Russell, T. P.; Liu, Y. *Angew. Chem. Int. Edit.* **2020**, **59**: 18131.

高效低维钙钛矿太阳能电池

刘永胜*

¹南开大学化学学院高分子化学研究所, 天津, 300071

*Email: liuys@nankai.edu.cn

低维钙钛矿（包括二维钙钛矿和二维/三维杂化钙钛矿）具有较三维钙钛矿更高的结构稳定性和环境稳定性。近年来，我们发展了系列基于有机共轭分子的配体材料，研究发现这类配体材料的引入可以促进前驱液预聚集成核，有效减少钙钛矿薄膜缺陷态密度，抑制钙钛矿材料中的离子迁移，提高材料的光、热及湿度稳定性能。主要研究进展包括：（1）针对准二维钙钛矿材料普遍采用绝缘的烷基或苯基配体，发展了系列新型共轭有机配体材料（如：噻吩甲铵，噻吩二甲铵，并噻吩二甲铵，噻吩甲脒等），其中二维RP钙钛矿太阳能电池实现19.06%的效率，二维DJ钙钛矿太阳能电池实现18.82%的能量转换效率，均为报道时的最高效率；（2）开发了甲基氯化铵辅助的准二维钙钛矿晶体生长与取向技术，实现了准二维钙钛矿的垂直结晶取向；（3）发现并阐明了准二维钙钛矿材料稳定性提高及内部电荷传输机制；（4）发现并揭示了二维钙钛矿诱导介孔碘化铅薄膜的形成机制，实现两步法制备大晶粒、无针孔、高质量二维/三维杂化钙钛矿薄膜，获得能量转换效率超过24%的光伏器件。

关键词： 二维钙钛矿； 二维/三维杂化钙钛矿； 太阳能电池； 稳定性

参考文献

- [1] Zhou, T.; Xu, Z. Y.; Wang, R.; Dong, X. Y.; Fu, Q.; Liu, Y. S. *Adv. Mater.* **2022**, 2200705.
- [2] Xu, Z. Y.; Lu, D.; Dong, X. Y.; Chen, M. Q.; Fu, Q.; Liu, Y. S. *Adv. Mater.*, **2021**, **33**, 2105083.
- [3] Lv, G. W.; Li, L.; Lu, D.; Xu, Z. Y.; Dong, Y. X.; Li, Q. H.; Chang, Z. T.; Yin, W. J., Liu, Y. S. *Nano Lett.* **2021**, **21**, 5788.
- [4] Lu, D.; Lv, G. W.; Xu, Z. Y.; Dong, Y. X.; Ji, X. F.; Liu, Y. S. *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, **142**, 11114.
- [5] Lai, H.T.; Lu, D.; Xu, Z.Y.; Zheng, N.; Xie, Z. Q.; Liu Y. S. *Adv. Mater.*, **2020**, **32**, 2001470.

高迁移率有机半导体——从带状稠环芳烃到环状稠合芳烃

陆雪峰^{1,*}, 刘云圻^{1,2}¹ 复旦大学材料科学系, 上海市杨浦区淞沪路 2005 号, 邮编: 200438² 中科院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街 2 号, 邮编: 100190

*Email: luxf@fudan.edu.cn

在有机场效应晶体管器件中, 最重要的材料无疑是高载流子传输性能材料, 对器件的制备和性能影响巨大。有机半导体材料的发展将会有力促进OFET领域的进步和实际应用。传统的高迁移率材料大都为单键相连的链状共轭体系, 而稠环芳烃作为石墨烯片段且具有可调控的带隙和空间几何结构特征而备受人们重视, 其中主要的挑战是稠合芳烃的化学湿法精准合成困难。不同于传统基于硫杂五元噻吩环的稠环芳烃, 我们设计合成了基于硫杂六元噻喃环的带状稠环芳烃并率先应用于单晶OFET器件中, 通过氯代工程和溶剂效应协同调控晶体堆积的策略获得了高迁移率的单晶场效应晶体管器件。在此基础上, 我们开发了系列拓扑结构可控且具有超分子电荷转移作用的环状稠合芳烃新体系, 并系统研究了这些环状稠合芳烃的OFET器件性能, 阐明了分子拓扑结构、聚集态结构和载流子传输性能的构效关系。这些研究成果拓展了高迁移率有机半导体材料体系, 为载流子传输性能构效关系研究提供了新思路。

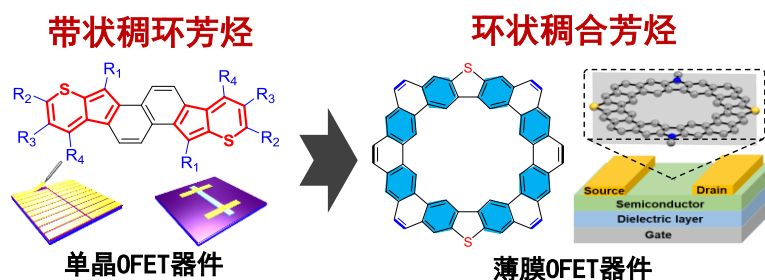


Fig. 1 Chemical structures of polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) semiconductors and the geometric configuration of OFET devices

关键词: 稠环芳烃; 稠合大环; 高迁移率材料; 超分子组装; 场效应晶体管

参考文献

- [1] Zhang, N.; Yang, L.; Zhu, J.; Chi, K.; Chang, D.; Qiao, Y.; Wang, T.; Zhao, Y.; **Lu, X.**; Liu, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, In Revision.
- [2] Qiao, Y.; Yang, L.; Zhu, J.; Yan, C.; Chang, D.; Zhang, N.; Zhou, G.; Zhao, Y.; **Lu, X.**; Liu, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143**: 11088.
- [3] **Lu, X.**; Gopalakrishna T. Y.; Han, Y.; Ni, Y.; Zou, Y.; Wu, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, **141**: 5934.

富勒烯聚合物在锡基钙钛矿器件中的应用

罗利平¹, 刘天华¹, 孙昌族¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

人工光电突触既能赋予电刺激和光刺激的传感特性, 又能实现临时记忆, 为快速开发人工视觉系统提供了可靠的解决方案。有机无机杂化锡基钙钛矿新材料是一种多元离子化合物, 在光照下钙钛矿结构中的碘离子会发生迁移, 对光电突触器件的行为有重要的调控作用。在近期的工作中, 我们构建了一个以FASnI₃为基础的柔性神经突触光电器件。此外, 所提出的神经光电突触器件可以模拟电和光诱导的突触功能, 如兴奋性突触后电流 (EPSC)、短期可塑性 (STP), 长期可塑性 (LTP) 和"学习-遗忘再学习"的行为等, 并能够表现出良好的灵活性, 在弯曲过程中没有明显的光电突触性能的退化。作为概念验证, 构建光电突触阵列, 用于感知和记忆图像信息。这项工作为先进的神经光电突触器件的合理设计提供了指导, 加速了柔性可穿戴神经光电突触器件的发展, 为图像感知、模式识别等领域发展提供材料支撑。

关键词: 锡基钙钛矿; 光电突触; 柔性器件; 图像感知; 模式识别

参考文献

- [1] Zhang, Z.; Sun, Q.; Lu, Y.; Lu, F.; Mu, X.; Wei, S.-H.; Sui, M. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 3397.
- [2] Wei, F.; Deng, Z.; Sun, S.; Zhang, F.; Evans, D. M.; Kieslich, G.; Tominaka, S.; Carpenter, M. A.; Zhang, J.; Bristowe, P. D.; Cheetham, A. K. *Chem. Mater.* **2017**, **29**: 1089.

单分子光谱成像与谱学反演

罗毅

合肥微尺度物质科学国家研究中心，中国科学技术大学，合肥，230026

*Email: yiluo@ustc.edu.cn

光谱技术是研究分子结构和特性的重要手段。由于光学衍射极限的限制，光谱的空间分辨通常在百纳米范围，远大于分子的几何尺寸。纳腔等离激元构造的局域场可以突破这一极限，为在亚纳米水平上可视化研究分子体系提供了机遇。我将围绕如何才能获得单分子光谱图像、如何从图像中获取分子结构信息、如何利用高分辨图像揭示分子内和分子间能量转移过程等问题，简要的介绍近年来单分子光谱成像理论和技术的发展。此外，还将介绍利用人工智能技术实现谱学反演的尝试。我们最近的研究发现，通过机器学习，可以直接建立红外拉曼光谱与分子-表面吸附多个化学参量的定量关系，这将极大的拓展光谱学的功能和应用范围。

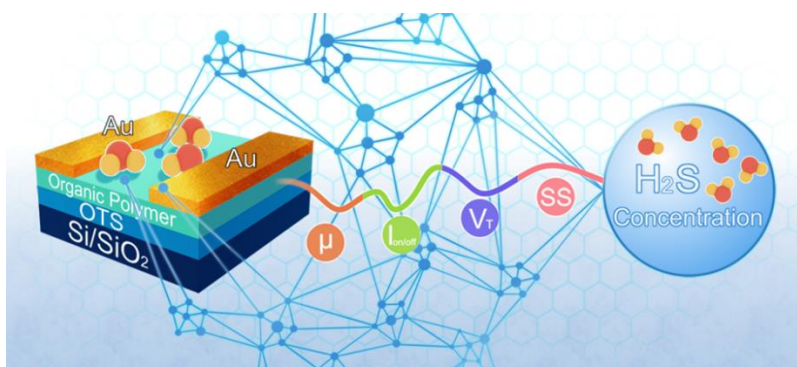
关键词：单分子光谱成像；局域场；人工智能；谱学反演

Concentration Recognition of Gas Sensor with Organic Field-Effect Transistor Assisted by Artificial Intelligence

Tingting Wang, Aifeng Lv (吕爱风),*

College of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai University of Engineering Science,
333 Longteng Road, Shanghai 201620, China

Many gas analytes have been detected with organic field-effect transistor (OFET) sensors. However, most of the analytes are detected with known concentrations and few OFET sensors have been used to quantify analytes. Here, we proposed the novel strategy to integrate the multiple independent parameters of OFETs with artificial neural network (ANN) to quantify toxic H₂S as a model. The precise concentration recognition was confirmed as the difference between real and predicted values was less than 5%. The H₂S sensors also showed high responsivity over 6500% at 150 ppm, and quick response in ten seconds. Moreover, the multiple parameters provided the possibility to differentiate eight different analytes. Thus, the artificial intelligence combined with OFET sensors realized precise quantification and fingerprint recognition of gas analytes for real applications.



Keywords: field-effect transistor, polymer, gas sensor, concentration recognition, quantify

Reference

- [1] Wang, T., Ma, S.; Lv, A.*; Liu, F.*; Yin, X.* *Sens. Actuators B Chem.*, **2022**, 363, 131854
- [2] Li, Y., Wang, T., Li, P., Zhang, Z., Lv*, A. *Mater. Lett.* 2022, 313, 131797

有机光伏的结晶性与能量损失控制

吕琨*

¹ 国家纳米科学中心, 北京市中关村北一条 11 号, 100190

*Email: lvk@nanoctr.cn

相比于无机和钙钛矿光伏体系, 目前限制有机光伏发展的瓶颈问题是其能量损失过大导致能量转换效率 (PCE) 偏低达不到实际应用需求。但是在过去的10年里, 该领域取得了长足的进步。毫无疑问, 新材料的发展带动了领域的快速发展。为了进一步提高有机光伏的效率, 有必要深入了解能量损失的来源, 并通过合理的分子设计进一步降低能量损失。深入地认识功能分子材料的结构与分子体系结晶性、器件能量损失和器件效率的关系等对推动该领域的发展具有重要意义。我们从有机光伏分子的化学结构出发, 通过分子堆积能力和结晶性调控, 对器件能量损失和效率的关联进行了深入探讨。并通过“拓展稠环”策略构建系列具有强结晶性的高效率材料^[1-3], 并通过降低重组能进而显著降低了器件的能量损失^[4], 并探讨了结晶性对大面积印刷成膜动力学的影响^[5]。

关键词: 有机光伏; 结晶性; 分子堆积; 能量损失

参考文献

- [1] Zhou, R.; Jiang, Z.; Yang, C.; Yu, J.; Feng, J.; Adil, M.; Deng, D.; Zou, W.; Zhang, J.; Lu, K.; Ma, W.; Gao, F.; Wei, Z. *Nat. Commun.* **2019**, *10*: 5393.
- [2] Chang, Y.; Zhu, X.; Shi, Y.; Liu, Y.; Meng, K.; Li, Y.; Xue, J.; Zhu, L.; Zhang, J.; Zhou, H.; Ma, W.; Wei, Z.; Lu, K. *Energy Environ. Sci.* **2022**, *15*, 2937.
- [3] Zhou, R.; Jiang, Z.; Shi, Y.; Wu, Q.; Yang, C.; Zhang, J.; Lu, K.; Wei, Z. *Adv. Funct. Mater.* **2020**, 2005426.
- [4] Shi, Y.; Chang, Y.; Lu, K.; Chen, Z.; Zhang, J.; Yan, Y.; Qiu, D.; Liu, Y.; Adil, M.; Ma, W.; Hao, X.; Zhu, L.; Wei, Z. *Nat. Commun.* **2022**, *13*: 3256.
- [5] Shen, Y.; Zhang, H.; Zhang, J.; Tian, C.; Shi, Y.; Qiu, D.; Zhang, Z.; Lu, K.; Wei, Z. *Adv. Mater.* **2023**, 2209030.

低维碳纳米复合物阴极界面材料及其光伏性能研究

吕梦岚

¹ 贵州大学，贵州省贵阳市花溪区，550025

*Email: mllv@gzu.edu.cn

低维碳纳米材料集突出的电学、力学、热学、光学等性能于一身，如高导电率和导热系数、良好的耐热性能和化学惰性，以及优异的柔韧性和水氧阻隔性等优点，在电子、信息、能源、航空航天、国防等诸多领域有着广阔的应用前景。为进一步提高阴极界面材料的电子传输和导电性能，开发可溶液加工的 n -掺杂石墨烯/碳纳米管阴极界面复合材料，该材料能够有效降低石墨烯/碳纳米管的功函数，改善材料的电子传输和导电性能，优化电极和活性层之间能级分布，有效提升电荷分离、调控光活性层形貌，从而提高光伏器件效率和稳定性。通过考察“分子结构-掺杂机理-器件性能”相互关系，为阴极界面材料的开发和高效有机太阳能电池的制备提供坚实的实验依据。

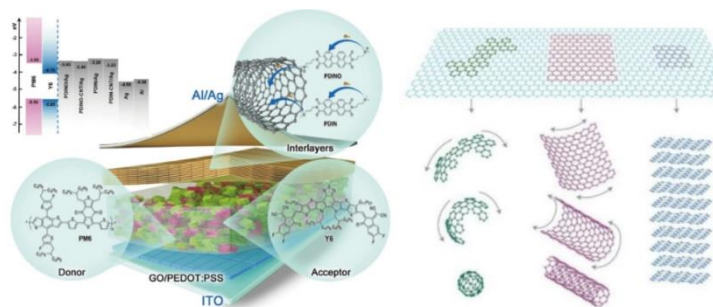


Fig. 1 Design of low-dimensional carbon nano-materials cathode interface composite and schematic diagram of organic solar cells

关键词： 阴极界面材料；低维碳纳米材料；有机太阳能电池

参考文献

- [1] Li, D. Q.; Geng, F. S.; Hao, T. Y.; Chen, Z.; Wu, H. B.; Ma, Z. F.; Xue, Q. F.; Lin, L.; Huang, R.; Leng, S. F.; Hu, B. W.; Liu, X. J.; Wang, J.; Zhu, H. M.; Lv, M. L.; Ding, L. M.; Fahlman M.; Bao, Q. Y.; Li, Y. F. *Nano Energy*, **2022**, **96**: 107133.
- [2] Pan, F.; Bai, S.; Liu, T. H.; Tang, D. Y.; Wei, X.; Chen, X. W.; Lv, M. L.; Li, Y. F. *Sci. China Chem.*, **2021**, **64**: 565.
- [3] Pan, F.; Bai, S.; Wei, X.; Li, Y. F.; Tang, D. Y.; Chen, X. W.; Lv, M. L.; Li, Y. F. *Sci. China Mater.*, **2021**, **64**: 277.
- [4] Pan, F.; Sun, C. K.; Li, Y. F.; Tang, D. Y.; Zou, Y. P.; Li, X. J.; Bai, S.; Wei, X.; Lv, M. L.; Chen, X. W.; Li, Y. F. *Energy Environ. Sci.*, **2019**, **12**: 3400.

基于富勒烯电子传输层的高效稳定全聚合物太阳电池

吕明升^{1,2}, 张占军^{2,*}, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学光电学院, 北京怀柔, 101408

²中国科学院大学化学科学学院, 北京怀柔, 101408

*Email: zhangzj@ucas.ac.cn; mengxiangyue@ucas.ac.cn

近年来, 全聚合物太阳电池的光电转换效率取得了前所未有的发展。然而, 较短的运行寿命仍是制约其商业化应用的最大障碍。在本研究中, 我们使用富勒烯C₆₀作为全聚合物太阳电池的电子传输层和紫外屏障。真空蒸镀的C₆₀薄膜具有高电导率、高电子迁移率、合适的能级结构以及良好的电子收集能力, 是优异的电子传输层材料。此外, C₆₀薄膜几乎不会吸附空气中的水和氧气, 并且表现出极强的疏水性。更为重要的是, C₆₀具有较强的紫外吸收和阻挡能力, 可以有效防止紫外辐射对器件稳定性的负面影响, 在5 mW cm⁻²紫外光的持续照射下, 基于C₆₀电子传输层器件的T₈₀寿命是基于ZnO电子传输层器件的24倍;此外, 基于C₆₀电子传输层的器件表现出优异的运行稳定性和放置稳定性, 在100 mW cm⁻²的白光LED照射下表现出970小时的T₈₀寿命, 代表了有机太阳电池稳定性的第一梯队; 在手套箱中放置6000小时后, 基于C₆₀的器件仍能保持初始性能的88.57%。这项工作为制造高效、稳定的有机太阳电池提供了一种简单、通用的策略。

关键词: 全聚合物太阳电池; 富勒烯; 电子传输层; 稳定性

参考文献

[1] 孟祥悦, 张占军, 吕明升, 一种稳定的以富勒烯为电子传输层的有机太阳能电池器件及制备方法和应用: 中国, 202211420750.5. 2023-1-31

有机嵌段结构纳米线的宏量制备及其光子学功能研究

吕强^{1,2}, 郑敏², 王雪东^{1,*}, 廖良生¹

¹苏州大学功能纳米与软物质研究院 (FUNSOM), 苏州市工业园区仁爱路 199 号, 215123

²苏州大学纺织与服装工程学院, 苏州市工业园区仁爱路 199 号, 215123

*Email: wangxuedong@suda.edu.com

具有精确定义的组成、结构和界面的有机异质结构纳米线由于其在催化、等离子体、光电等领域的潜在应用而吸引了广泛的关注。然而，由于不同有机组分的晶格失配问题难以解决，大规模构建有机异质结构仍然是一个巨大的挑战，也限制了它们在未来的实际应用。因此，开发一条普适性的合成路线，既能够实现大规模制造，又能够实现多功能有机异质结构具有重要意义。在此，我们提出了一种用于有机半导体分级自组装的无晶格失配生长的概念，实现大规模、可控地合成有机异质结构纳米线。其中，有机合金的构建，是基于受体分子结构相似性和分子间的相互竞争作用实现的。最后，基于无晶格失配生长的概念，通过选择合适的给体和受体分子制备了十几种有机三嵌段纳米线（如下图），这表明该策略对于有机异质结构纳米线的制备存在普适性。并且，基于各种异质结构纳米线实现了全色可调的光致发光性能，可以满足光信号处理的不同需求，为将来光子学发展提供材料基础。

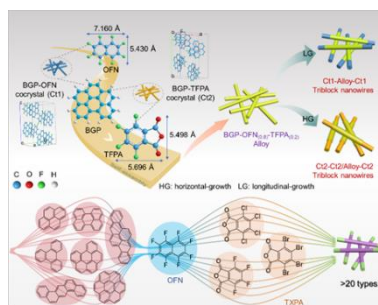


Fig. 1 Schematic diagram of the co-assembly of cocrystal and alloy into triblock heterostructures

关键词: 有机异质结构; 微纳晶体; 外延生长; 有机合金; 有机光子学

参考文献

- [1] Lv, Q.; Wang, X. D.; Yu, Y.; Zhuo, M. P.; Zheng, M.; Liao, L. S. *Nat. Commun.* **2022**, *13*: 3099.
- [2] Lv, Q.; Wang, X. D.; *Sci. Bull.* **2022**, *67*: 991.
- [3] Lv, Q.; Wang, X. D.; Yang, W. Y.; Wang, K. L.; Xu, C. F.; Zheng, M.; Liao, L. S. *CCS Chem.* **2023**, *5*: 423.
- [4] Lv, Q.; Wang, X. D.; Liao, L. S. *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *32*: 2202364.
- [5] Lv, Q.; Zheng, M.; Wang, X. D.; Liao, L. S. *Small*, **2022**, *18*: 2203961.

Low Voltage Organic Area-Emitting Transistor

Chao-Fan Ma (马超凡)¹

¹Beijing National Laboratory for Molecular Sciences Key Laboratory of Organic Solids
Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences Beijing 100190, P. R. China
Beijing, 100190, P. R. China *Email: machaofan@iccas.ac.cn

Organic light-emitting transistors (OLETs), integrating the functions of an organic field-effect transistor (OFET) and organic light-emitting diode (OLED) in a single device, are promising for the next-generation display technology. OLETs had some obvious disadvantages such as high operating voltage and low luminescence. Gate dielectric layer is a critical constituent for fabricating low-voltage high-performance transistors, which is crucial for achieving good interfacial compatibility with the semiconductor layer and ensure sufficient capacitance to reduce the operating voltage of devices. The layer-to-layer interfacial contact and interaction is of crucial significance for improving the photoelectric properties of the devices. The multilayer heterojunction could significantly enhance the layer-to-layer van der Waals interaction and interfacial compatibility, which was responsible for the dipole shielding, carrier transport, exciton generation, exciton recombination, and current density distribution. The as-fabricated multilayer heterojunction organic light-emitting transistor (MLH-OLET) arrays exhibited uniform RGB area emission and low drive voltage of below 30 V.

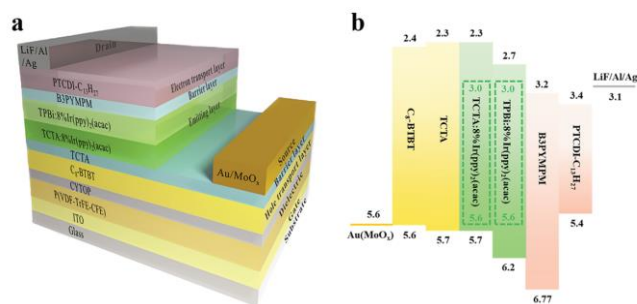


Fig. 1 Device structure and component materials of the van der Waals multilayer heterojunction organic light-emitting transistors (MLH-OLETs). a) Schematic device structure of the MLH-OLETs. b) Energy level diagram of the MLH-OLETs.

Keywords: Low voltage , Organic Area-Emitting Transistor

Reference

[1] Pan, Z., Liu, K., Miao, Z., Guo, A. *Adv. Mater.* **2023**, **35**, 2209097.

热激子与高效 OLEDs

马东阁^{1*}

¹ 聚集诱导发光中心, 高分子光电材料与器件研究所, 广东省分子聚集发光重点实验室, 发光材料与器件国家重点实验室, 华南理工大学, 广州市天河区五山路 381 号, 510640

*Email: msdgm@scut.edu.cn

OLEDs是新一代的显示和照明技术。实际应用要求OLED具有高效率、长寿命和低成本的要求。相比之下, 荧光OLEDs具有寿命长、成本低的优点, 但存在效率低的问题, 热激子及其利用是改善荧光OLEDs的有效方法。本报告介绍了我们在热激子及其荧光OLEDs方面的最新研究结果。研究发现, 热激子对器件效率有显著影响, 掺杂后的蓝光荧光OLEDs的最大EQE达到17.4%。

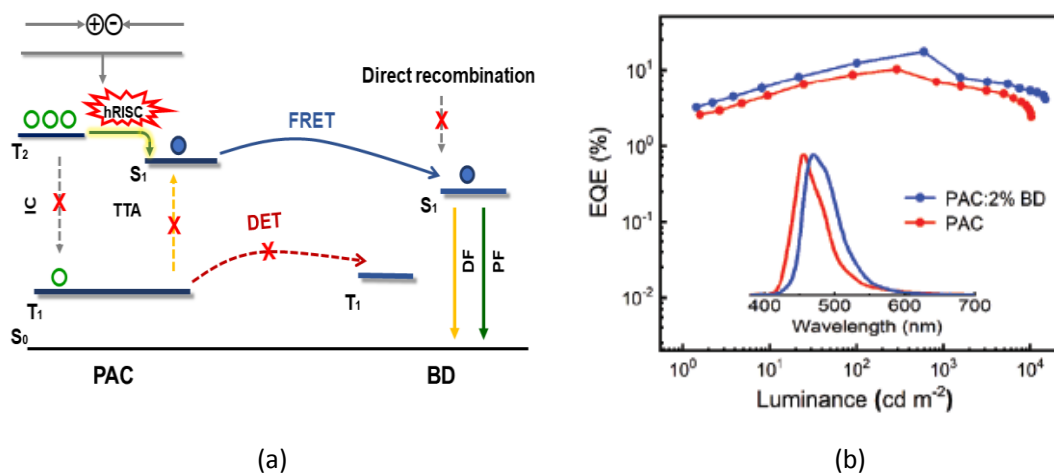


Fig. 1 (a) EL processes of the PAC doped blue fluorescent OLEDs and (b) EQE-luminance characteristics of doped and undoped OLEDs. The inset is their EL spectra.

关键词: 热激子; 有机发光二极管; 激子利用率; 蓝光

参考文献

- [1] Guo, X.; Yuan, P.; Qiao, X.; Yang, D.; Dai, Y.; Sun, Q.; Qin, A.; Tang, B. Z.; Ma, D. *Adv. Funct. Mater.* **2020**, *30*: 1908704.
- [2] Guo, X.; Yuan, P.; Fan, J.; Qiao, X.; Yang, D.; Dai, Y.; Sun, Q.; Qin, A.; Tang, B. Z.; Ma, D. *Adv. Mater.* **2021**, *33*: 2006953.
- [3] Lin, C.; Han, P.; Xiao, S.; Qu, F.; Yao, J.; Yang, D.; Dai, Y.; Sun, Q.; Hu, D.; Qin, A.; Ma, Y.; Tang, B. Z.; Ma, D. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31*: 2106912.

氰基乙酸供体-受体化合物对钙钛矿的表面钝化和二次结晶调控

马东羽, 庄旭晖, 赵娟*, 杨志涌, 张艺*, 池振国*

中山大学, 广东省广州市番禺区小谷围街道外环东路 132 号, 510006

*Email: 919972435@qq.com

现有许多界面工程方法来解决钙钛矿太阳能电池 (PSC) 的缺陷问题。然而, 传统的表面钝化对消除钙钛矿的内部缺陷, 减少不完全结晶导致的残留物的作用有限, 而二次结晶 (SGG) 则受到有限的添加剂选择和钙钛矿固有性质的限制, 不利于电池性能的进一步提高。本文提出了一种利用表面钝化和SGG的协同策略来修饰MAPbI₃钙钛矿的内部和外部, 通过使用含氰基乙酸的供体-受体化合物 (CA-D-A) 处理钙钛矿的表面。与未处理的钙钛矿相比, CA-D-A处理的钙钛矿因SGG而表现出更好的结晶度, 由于表面钝化和SGG的协同作用而表现出更低的陷阱密度, 以及更合适的能级结构。因此, 与未经任何处理的PSC相比, 经CA-D-A处理的基于MAPbI₃的PSC表现出更高的开路电压和填充因子, 导致能量转换效率 (PCE) 和器件稳定性的提高。尤其是经CAMA处理的PSC, 其平均PCE从17.77% (对照PSC) 提高到18.71%, 通过进一步优化, 获得了19.71%的效率。这项工作为在表面钝化和SGG的帮助下开发高效稳定的PSC提供了一种有效的策略。

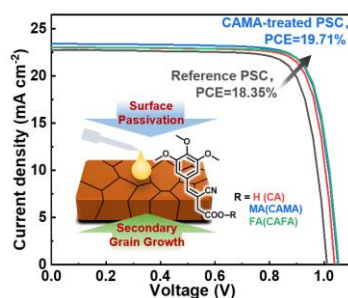


Fig. 1 Strategy of Combining Surface Passivation and Secondary Grain Growth

关键词: 钙钛矿太阳能电池; 表面钝化; 二次结晶

参考文献

[1] Ma, D.; Li, W.; Chen, X.; Yang, Z.; Zhao, J.; Yang, Z.; Zhang, Y.; Chi, Z. *Small* **2021**, *17* (25), 2100678.

有机半导体中光谱与超快动力学过程的理论研究

马海波^{1,*}

¹ 山东大学前沿交叉科学青岛研究院, 青岛, 266237

*Email: haibo.ma@sdu.edu.cn

基于共轭分子的有机半导体材料具有成本低、易制造、轻量、柔性、透明、环境友好等优势, 在光电信息传输和能源转换领域越来越受瞩目。但是, 相较于无机半导体材料, 有机半导体材料中介电屏蔽弱、电子-电子和电子-振动/声子相互作用强, 其微观理论机制的可靠描述需要综合考虑这些相互作用的量子多体模型及其高精度理论求解。我们近期的工作表明, 通过结合激发态量子化学计算、激子-振动/声子哈密顿和量子动力学模拟, 理论计算可以合理阐释和预测分子聚集体的荧光发射光谱¹、超快激子解离²⁻³、深空穴转移⁴和分子间与分子内单线态裂分⁵⁻⁷等实验现象。

关键词: 激子; 声子; 激发态; 量子动力学; 单线态裂分

参考文献

- [1] Zhao, H.; et al. *Nat. Commun.* **2019**, **10**: 5589.
- [2] Yao, Y.; Xie, X.; Ma, H. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, **7**: 4830.
- [3] Yao, Y.; Sun, K.; Luo, Z.; Ma, H. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, **9**: 413.
- [4] Xie, X.; Zhang, C.; Ma, H. *J. Chem. Phys.* **2020**, **153**: 054705.
- [5] Xie, X.; et al. *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, **15**: 3721.
- [6] Wang, Z.; et al. *Nat. Chem.* **2021**, **13**: 559.
- [7] Mardazad, S.; et al. *J. Chem. Phys.* **2021**, **155**: 194101.

大面积印刷有机光伏器件的原位形貌调控

马伟

西安交通大学材料学院，咸宁西路 28 号，710049

*Email: msewma@xjtu.edu.cn

与卷对卷加工相结合的狭缝挤出成膜法一直被视为是最适用于有机太阳能电池大面积加工的技术，然而使用该技术加工的电池器件效率远低于实验室中采用旋涂法加工的器件效率。提高狭缝挤出法制备的电池器件对于有机太阳能电池的大面积应用至关重要，而活性层形貌优化是提高电池器件效率的重中之重。活性层形貌取决于不同的加工工艺，为了进一步理解狭缝挤出成膜工艺对活性层形貌的影响并对工艺参数进行优化，深入研究狭缝挤出法的成膜动力学有着重要意义。在此，我们通过原位吸收光谱和原位掠入射广角X射线散射技术揭示了狭缝挤出成膜加工过程中的聚集和结晶演化过程，结合电学光学测试系统性地研究了加工温度（基底温度和溶液温度）对不同体系形貌演变和器件性能的影响^[1,2]。研究表明不合适的溶液温度影响了给体聚集和受体结晶的竞争，从而导致了相分离尺寸过大，进而降低了激子解离效率；过高、过低的基底温度则引发了结晶形核和晶体生长时间的竞争，从而导致了低的结晶度，进而缩短了载流子寿命，增加了非辐射复合损失。我们的工作将有助于进一步理解加工工艺，溶液聚集，成膜动力学，器件物理和器件性能之间的相互关系，并且指导有机太阳能电池大面积加工时的工艺优化。

关键词： 有机光伏；大面积加工；形貌

参考文献

- [1] B. Lin, X. Zhou, H. Zhao, J. Yuan, K. Zhou, K. Chen, H. Wu, R. Guo, M. A. Scheel, d A. Chumakov, S. V. Roth, Y. Mao, L. Wang, Z. Tang, P. Müller-Buschbaum, W. Ma. *Energy Environment Science*, 2020, 13, 2467-2479.
- [2] H. Zhao, H. B. Naveed, B. Lin, X. Zhou, J. Yuan, K. Zhou, H. Wu, R. Guo, M. A. Scheel, A. Chumakov, S. V. Roth, Z. Tang, P. Müller-Buschbaum, W. Ma. *Advanced Materials*, 2020, 32, 2002302.

Structurally Nontraditional Bipolar Hosts for RGB Phosphorescent OLEDs: Boosted by a “Butterfly-Shaped” Medium-Ring Acceptor

Weixin Ma (马蔚欣), Z. Bin*, J. You*

Key Laboratory of Green Chemistry and Technology of Ministry of Education, College of Chemistry, Sichuan University 29 Wangjiang Road, Chengdu 610064 (P. R. China)

*Email: binzhengyang@scu.edu.cn

jyou@scu.edu.cn

The emitting layer based on a host–guest system plays a crucial role in organic light-emitting diodes (OLEDs). While emitters have witnessed rapid progress in structural diversity, hosts still rely heavily on traditional structures and are underdeveloped. Herein a “medium-ring” strategy has been put forward to design structurally nontraditional host molecules, which are not only rotatable enough to suppress close π – π stacking, thus reducing exciton annihilation, but also rigid enough to prevent excessive conformational flipping, thus inhibiting non-radiative decay. Accordingly, a brand-new type of bipolar hosts with a twisted “butterflyshaped” heptagonal acceptor (EtBP), which features an electron-deficient benzophenone fragment with a flexible ethylidene bridge, has been developed. With satisfactory morphological stability and well-balanced hole- and electrontransporting properties, the EtBP-based bipolar hosts enable high-performance RGB phosphorescent OLEDs with small efficiency roll-off, which are superior to those of acyclic benzophenone-based devices.

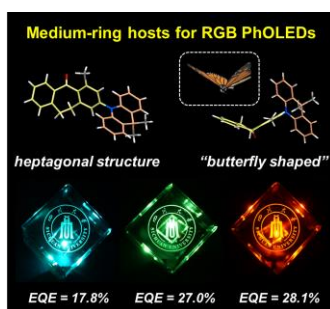


Fig. 1 The EtBP-based bipolar hosts enable high-performance RGB phosphorescent OLEDs

Keywords: Balanced Hole- and Electron-Transporting Properties, Bipolar Host, C–H/C–H Cross-Coupling, Medium-Ring Acceptor, Phosphorescent OLEDs

Reference

- [1] Y. Luo, Z. Liu, G. Yang, T. Wang, Z. Bin, J. Lan, D. Wu, J. You, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 18852-18859; *Angew. Chem.* **2021**, 133, 19000-19007;

烷基侧链对称性与有机半导体器件性能与应用关系研究

马晓颖, 张凤娇*

中国科学院大学化学科学学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

*Email: fjiaozhang@ucas.ac.cn

得益于新型有机半导体分子的设计与合成, 高性能有机场效应晶体管已取得较大发展。其中侧链工程是优化分子组装、薄膜聚集态以及调控载流子传输的重要途径^[1]。目前烷基侧链的构型(直链、支链、环形链)、烷基链长度、分支点位置等参数对器件性能的影响已有报道^[2-4], 然而烷基取代基团的不对称性与分子堆积和电荷转移的关系仍缺乏系统研究。

基于此, 我们设计了七种含有不同烷基侧链的NDI-DTYM2衍生物, 研究了烷基链的对称性对该材料载流子输运和电荷转移的影响。结合有机晶体管器件构建与表征、原子力显微镜(AFM)、X射线衍射光谱(XRD)、紫外可见光谱(UV-Vis)、荧光光谱(FS)等表征方法, 探究了半导体分子烷基链对称性-分子堆积-器件电学性能的影响, 进一步探究了分子堆积与器件传感性能之间的关系, 为有机场效应晶体管的功能应用提供基础。

关键词: 有机晶体管; 不对称烷基链; 分子堆积; 电荷转移

参考文献

- [1] Liu Z.; Zhang G.; Zhang D. *Acc. Chem. Res.* **2018**, **51**: 1422.
- [2] Zhang F.; Hu Y.; Schuettfort T.; Di C.; Gao X.; McNeill C. R.; Thomsen L.; Mannsfeld S. C. B.; Yuan W.; Sirringhaus H.; Zhu D. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, **135**: 2338.
- [3] Welford A.; Maniamb S.; Ganna E.; Jiao X.; Thomsen L.; Langford S. J.; McNeill C. R. *Org. Electron.* **2019**, **75**: 105378.
- [4] Zhang F.; Di C.; Berdunov N.; Hu Y.; Hu Y.; Gao X.; Meng Q.; Sirringhaus H.; Zhu D. *Adv. Mater.* **2013**, **25**: 1401.

共轭骨架无 sp^3 碳类稠环电子受体的分子堆积和取向行为调控

马云龙^{1,*}, 郑庆东^{2,*}

¹中国科学院福建物质结构研究所, 福州, 350002

²南京大学现代工程与应用科学学院, 南京, 210093

*Email: mayunlong@fjirsm.ac.cn; zhengqd@nju.edu.cn

电荷传输是有机光伏器件实现光电转换的一个重要环节。不同于各向同性传输的富勒烯类电子受体, 非富勒烯电子受体的分子间电荷传输具有各向异性的特点, 因此如何通过结构设计精准调控分子的堆积与取向对于获得高性能稠环电子受体极为关键。前期的研究中, 我们发展了一类共轭骨架不含 sp^3 杂化碳的稠环电子受体, 并提出采用“邻位侧链”策略来抑制稠环分子的过度聚集行为。进一步研究发现, 通过改变邻位侧链中氮原子上侧链的体积可以精准调控目标电子受体的分子取向行为, 其中含有支化结构侧链的受体分子主要采用face-on取向; 通过改变侧链长度来调节邻位侧链间空间位阻的大小, 可以实现对目标受体的分子间 π - π 堆积距离调控; 通过优化邻位侧链间距可以有效调控目标受体分子在混合膜中聚集态; 通过优化电子受体的分子间弱相互作用可以实现对分子堆积的精准调控, 从而获得具有3D网状分子堆积结构的电子受体。基于优化后的电子受体M36实现了光电转换效率超过17%的光伏器件。

关键词: 有机太阳能电池; 稠环电子受体; 邻位侧链

参考文献

- [1] Ma, Y.; Sun, R.; Chen, Z.; Zhang, S.; Cai, D.; Wan, S.; Lin, W.; Zhang, S.-Q.; Tu, Q.; Ma, W.; Min, J.; Hao, X.; Zheng, Q. *Nano Energy* **2023**, **107**: 108116.
- [2] Ma, Y.; Zhang, M.; Wan, S.; Yin, P.; Wang, P.; Cai, D.; Liu, F.; Zheng, Q. *Joule* **2021**, **5**: 197.
- [3] Ma, Y.; Luan, S.; Cai, D.; Zhang, S.-Q.; Wang, J.-Y.; Tu, Q.; Zhu, Y.; Zheng, Q. *Aggregate* **2023**, DOI: 10.1002/agt2.322.

基于共平面电极的交流驱动的电致发光器件

孟鸿^{1*}, 张超红¹, 纪君鹏¹ 杨标¹

¹ 北京大学深圳研究生院, 广东深圳南山区桃源街道丽水路 2199 深圳大学城北大校区, 邮编

*Email: menghong@pku.edu.cn

随着光电子技术的飞速发展和人类对电致发光器件的多功能需求, 电致发光器件正朝着多功能化、数字化、智能化方向发展。一般的三明治交流电致发光器件将发光有源层夹在两个电极之间, 因此需要一个透明的电极来实现光的输出。我们课题组于2017年首次由提出基于ZnS:Cu荧光粉的共平面电极AC-EL器件, 并将该器件结构拓展至OLED和QLED发光领域; 基于共平面电极结构, 我们陆续设计了三相电驱动的交流电致发光器件和可三相交流电驱动可数字编程控制的全色彩OLED器件; 为了克服共平面电极交流电致发光器件难以图案化的缺陷, 我们基于简单的串联分压原理设计了一种新型的非对称增强的共平面电极交流电致发光器件, 实现了可拉伸电致发光显示领域最高的拉伸性能, 该器件可以稳定工作在高交流电频率和高电压下以实现高亮度和广色域。

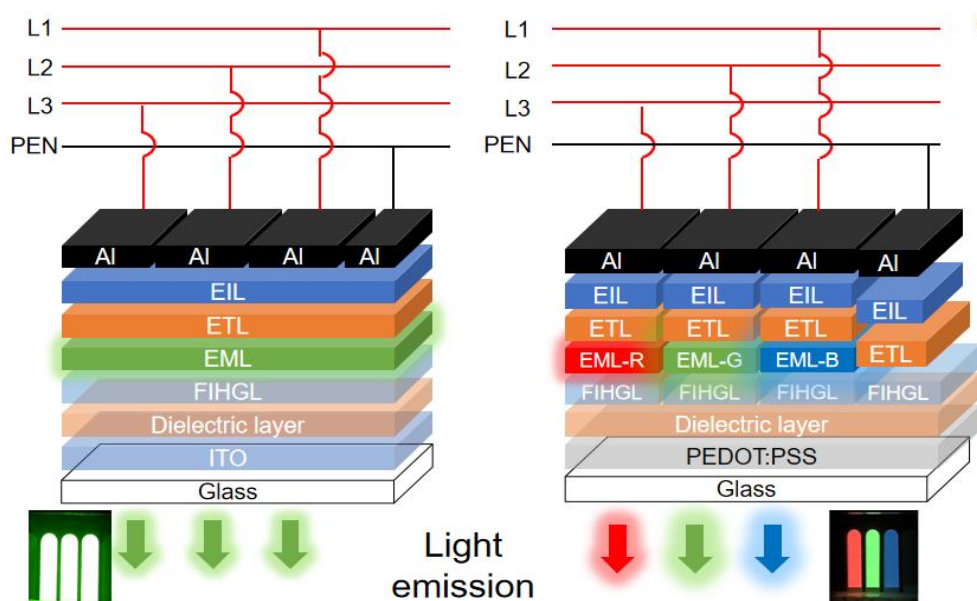


Fig. 1 Three-phase electric power driven OLED

关键词: 交流电驱动; 共平面电极; 电致发光;

参考文献

- [1] B. Yang, Y. Zhao, M. U. Ali, J. Ji, H. Yan, C. Zhao, Y. Cai, C. Zhang*, **H. Meng***, *Adv Mater.* 2022, 34, 2201342
- [2] J. Ji, I. F. Perepichka, J. Bai, D. Hu, X. Xu, M. Liu, T. Wang, C. Zhao, **H. Meng***, W. Huang*. *Nat. Commun.* 2021, **12**, 54 (2021).
- [3] X. Xu, D. Hu, L. Yan, S. Fang, C. Shen, Y. L. Loo, Y. Lin, C. S. Haines, N. Li, A. A. Zakhidov, **H. Meng***, R. H. Baughman*, W. Huang*. *Adv. Mater.* 2017, **29**, 1703552.
- [4] J. Ji, B. Yang, C. Zhang, et al., Hong Meng, *SmartMat.* 2023;4:e1153.

无铅锡基钙钛矿太阳能电池

孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101408

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

无铅锡基钙钛矿具有高的载流子迁移率 ($1000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)、低的激子结合能 (18 meV)、长的热载流子寿命 (ns) 和较窄的带隙 (1.3 eV), 理论光伏效率达到33%以上, 是最有发展前景的无铅钙钛矿新概念材料。然而相比于铅基钙钛矿, Sn^{2+} 路易斯酸性较强, SnI_2 的溶解度较低, 锡空位的形成能较低, 导致溶液法制备锡基钙钛矿薄膜时晶体成核和生长速率不平衡, 造成薄膜缺陷较多, 限制了无铅锡基钙钛矿太阳能电池光电转换效率的提高。针对上述问题, 从结晶的热力学和动力学机理出发, 精准控制无铅锡基钙钛矿薄膜中的晶体快成核、慢生长。提出了降低表面能、构筑预成核团簇和定向搭接生长等新的结晶调控策略, 揭示了无铅钙钛矿薄膜中晶体成核和生长的新机制, 发展了原位光谱表征技术监测成核和生长速率, 实现了无铅钙钛矿薄膜微结构的精准控制, 光伏效率达到14%以上。

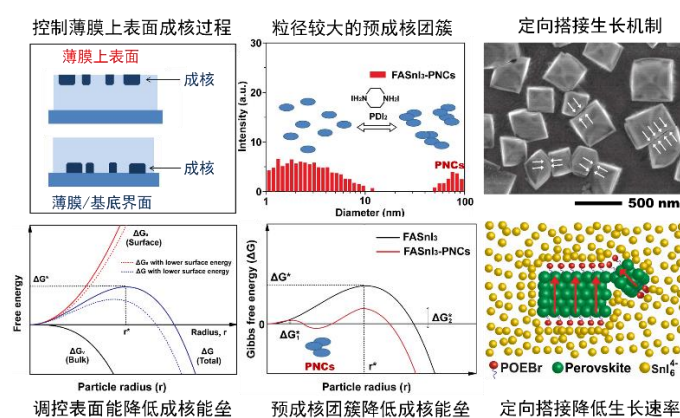


图1 无铅钙钛矿薄膜结晶调控

关键词: 无铅钙钛矿; 太阳能电池; 结晶成膜动力学

参考文献

- [1] Wang, J.; Yang, S.; Meng, X.* et al. *ACS Energy Lett.* **2023**, 8, 1590.
- [2] Wang, J.; Meng, X.*; Yang S. et al. *Adv. Energy Mater.* **2021**, 11, 2102131.
- [3] Meng, X.*; Yang S. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 3693.
- [4] Meng, X.; Han L.* et al. *Joule* **2020**, 4, 902.
- [5] Meng, X.; Han L.* et al. *Adv. Mater.* **2019**, 31, 1903721.

非富勒烯有机光伏器件中实现反转单重态和三重态电荷转移态的设计规则

苗晓丹¹, 韩广超^{1,*}, 易院平^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: gchaohan@iccas.ac.cn

*Email: ypyi@iccas.ac.cn

基于非富勒烯受体的有机太阳能电池在低驱动力下可实现高效的电荷产生, 但与其他光伏技术如无机半导体和钙钛矿光伏电池相比, 能量损失依然很大。目前, 在有机太阳能电池中降低电压损失的有效策略是尽量减小最低单重激发态和电荷转移态间的能量差。最近的研究表明, 电荷转移态与最低三重激发态间的巨大能量差将会产生一个额外的三重态能量损失通道, 且是一个严重限制有机太阳能电池工作效率的重要过程。但是, 三线态损失的潜在机制尚不明确, 缺乏有效的抑制手段。我们的工作以高效率非富勒烯光伏体系为研究对象, 运用合理的量子化学方法精确表征研究体系激发态电子结构和能级排列等性质, 并基于电子转移理论理解激子解离和电荷复合过程。我们的结果强调了电荷转移态与分子三线态的杂化对造成的三重电荷转移态高于单重电荷转移态的能级排列的重要性, 建立了一种有效抑制体系三重态损耗路径的策略, 对分子设计和器件优化提供了针对性的帮助。

关键词: 有机太阳能电池; 能量损失; 三线态; 量子化学

参考文献

- [1] Gillett, A.J.; Privitera, A.; Dilmurat, R.; Karki, A. *Nature*. **2021**, **597**: 666-671.
- [2] Kotova, M. S.; Londi, G.; Junker, J.; Dietz, S. *Materials Horizons*. **2020**, **7**: 1641-1649.

Balancing the Efficiency, Stability, and Cost Potential for Organic Solar Cells via A New Figure of Merit

Jie Min (闵杰)^{1,*}

¹The Institute for Advanced Studies, Wuhan University, Wuhan 430072, China

*Email: min.jie@whu.edu.cn

Because of the vigorous design and development of organic photovoltaic materials, power conversion efficiency (PCE) is improved rapidly, approaching the threshold of 20%. However, the high costs and intrinsic operational insability of organic solar cells (OSCs) have slowed down its commercialization. In this work, we found that the thermal stability is greatly enhanced as thinner the thickness of active layer. Extended research found that the active layer thickness influences operational stability almost identically as thermal stability for the investigated systems. Thus, a new i-FoM model (i.e., i-FoM2.0) is introduced as a rational guideline for verifying the true potential of next-generation organic photovoltaic materials in real-world outdoor applications. This work provides a generally available strategy to minimize the efficiency-stability-cost gap and promised the economic prospects of OSCs.

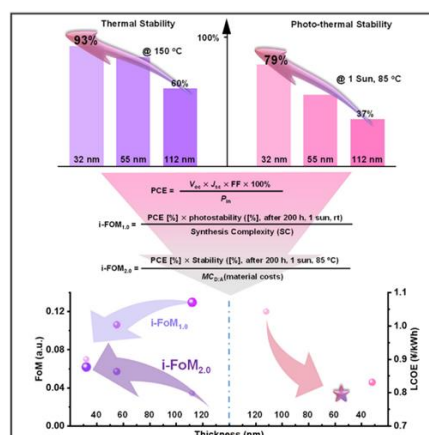


Fig. 1 Relevant figure of merit formulations for evaluating organic photovoltaic materials.

Keywords: organic photovoltaic, device efficiency, material cost, thermal stability, industrial figure-of-merit

Reference

- [1] Yang, W.; Wang, W.; Wang, Y.; Sun, R.; Guo, J.; Li, H.; Shi, M.; Guo, J.; Wu, Y.; Wang, T.; Lu, G.; Brabec, C.; Li, Y.; Min, J., *Joule* **2021**, *5*: 1209.
- [2] Min, J.; Luponosov, Y.; Cui, C.; Kan, B.; Chen, H.; Wan, X.; Chen, Y.; Ponomarenko, S.; Li, Y.; Brabec, C., *Adv. Energy Mater.*, **2017**, *7*: 1700465.

锡基钙钛矿光电转换材料与器件

姜显园¹, 李晗升¹, 虞丹妮¹, 魏旗¹, 宁志军^{1*}

¹, 上海科技大学物质学院, 上海市浦东新区华夏中路 393 号, 201210

*Email: ningzhj@shanghaitech.edu.cn

卤素钙钛矿是极具前景的新型光电转换材料, 但是铅钙钛矿的毒性为其应用带来了一定的不确定性, 开发无毒或低毒的钙钛矿光电材料具有重要意义。在众多元素中, 同族的具有相似壳层电子结构的锡吸引了广泛关注, 锡钙钛矿具有理想的带隙 ($\approx 1.3 \text{ eV}$)、优良的载流子迁移率和吸光性质。但锡基钙钛矿也具有高本征空位浓度和易氧化的缺点, 限制了器件性能的提高。

我们发展了基于低维结构的锡钙钛矿太阳能电池体系, 利用低维结构增强了锡基钙钛矿薄膜的抗氧化性, 降低了钙钛矿薄膜的缺陷浓度, 大幅提高了锡钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性。在低维锡钙钛矿结构的基础上, 通过纳米结构调控进一步减少了薄膜的缺陷, 通过器件结构调控减低了界面载流子复合, 通过锡钙钛矿生长动力学调控提高了晶体质量, 有效提升了准二维结构的取向性, 使锡钙钛矿太阳能电池认证效率提升到14.6%。此外我们发现了锡基钙钛矿的自限域缺陷发光现象、制备了高质量二维锡钙钛矿单晶, 并将锡钙钛矿用于电致发光器件和圆偏振手性光探测器等领域。

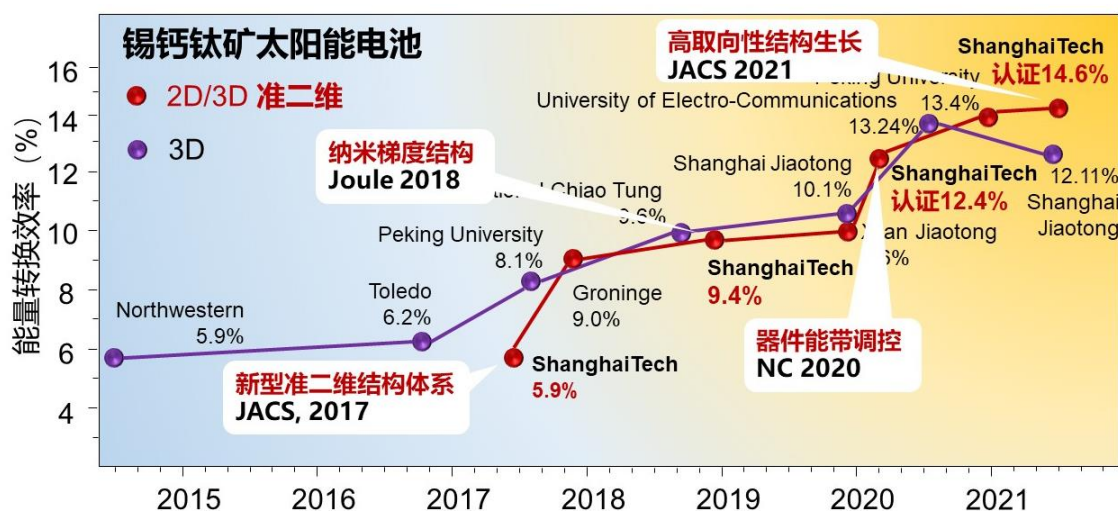


Fig. 1 The efficiency improvement of tin perovskite solar cells.

关键词: 太阳能电池、电致发光、探测器、钙钛矿、非铅

参考文献

- [1] *Accounts of Materials Research*, 2021, 2, 210-219; *Science China Chemistry*, 2023, 66, 459-465; *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 10970-10976; *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 16330-16336; *Joule*, 2018, 2, 2732-2743.; *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, 139, 6693-6699. *Nat. Commun.*, 2020, 11, 1245. *Nano Letters*, 2023, 23, 5, 1938-1945.; *Trends in Chemistry*, 2022, 4, 1, 1-4.; *Nanoscale*, 2022, 14, 2248-2255.

范德华多层异质结制备低压有机 RGB 面发光晶体管阵列

潘志超^{1,2}, 刘凯^{1,2}, 郭云龙^{1,2*}, 董焕丽^{1,2*}, 刘云圻^{1,2*}¹中国科学院化学研究所有机固体重点实验室, 北京, 100190²中国科学院大学化学科学学院, 北京, 100049

*Email: liuyq@iccas.ac.cn

有机发光晶体管(OLETs)因其在下一代显示技术、多功能器件和有机电泵浦激光器等领域具有潜在的应用价值而受到学术界和工业界的广泛关注。然而如何将低功耗、高外量子效率(EQE)和均匀的面发光在单一器件中实现是一个长期问题,这严重限制了OLETs在显示技术领域的发展和應用。为此,提出了一种范德华多层异质结结构,该结构可以明显增强层与层之间范德华作用力和界面接触,有利于偶极子屏蔽、载流子传输、激子产生、激子复合和电流密度分布。使用该策略制备的范德华多层异质结OLET(MLH-OLETs)显示出均匀且明亮的RGB面发光和低工作电压(30 V),并且在面发光下展现出高亮度(1060 cd m^{-2})、高EQE(0.85%)和高环路稳定性(超过380次循环),研究表明该多层异质结结构明显优于目前报道的横向器件结构。因此开发的范德华多层异质结制备的低电压、高性能和低成本OLET阵列将进一步满足未来显示技术的要求。

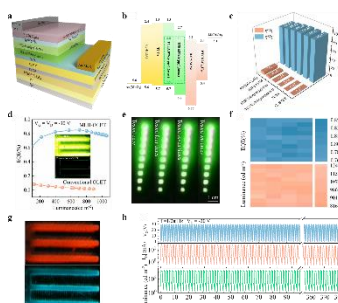


Fig. 1 a) Schematic device structure and b) Energy level diagram of the MLH-OLETs. c) Dispersive component/surface energy (γ_s^d/γ_s) ratios and polar component/surface energy (γ_s^p/γ_s) ratios of various organic functional layers for MLH-OLETs. d) EQE-luminance curves and luminous photographs of the MLH-OLETs and conventional OLETs ($V_G = V_D = -30 \text{ V}$). e) Luminous photograph of an MLH-OLET array ($V_G = V_D = -30 \text{ V}$). f) Maximum EQE and luminance summarized from 40 organic area-emitting transistors. g) The luminescence photographs of the red and blue MLH-OLETs ($V_G = V_D = -30 \text{ V}$). h) Stability measurements under the sine function $V_G = -30.0 \sin(\text{time})$.

关键词: 范德华作用力; 多层异质结; 低压; RGB面发光; 有机发光晶体管阵列

参考文献

[1] Pan, Z. #; Liu, K. #; Guo, Y. #; Dong H. #; Liu, Y. # *Adv. Mater.* **2022**: e2209097.

基于二维有机单晶的柔性晶体管及电路

彭博宇^{1,*}, 李寒莹¹

¹ 浙江大学高分子科学与工程学系, 杭州 310027

* Email: pengboyu@zju.edu.cn

溶液法制备的大面积二维有机单晶具有长程有序的分子共轭结构以及聚集态结构高度均一的优势, 在具有高迁移率的同时也表现出高效电荷注入、器件均一性高等优势; 同时, 低维有机单晶的结构稳定性受界面结合能主导, 与柔性基底和绝缘层材料的兼容性好, 器件可表现出良好的机械柔性。综上, 二维有机单晶是用于高性能柔性晶体管及电路的理想活性层材料之一。基于蔡并噻吩 (DNNT) 类有机半导体分子, 采用溶液剪切法、固定液滴法等溶液制备方法制备得到的大面积层数可控的二维有机单晶, 具有高达 $10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的迁移率、低于 $100 \text{ ohm} \cdot \text{cm}$ 的接触电阻以及优异的空气稳定性。以此类二维有机单晶构建的柔性晶体管阵列及电路具有优异的电学性能和机械柔性, 有望进一步应用于较大规模有机晶体管柔性集成电路中。

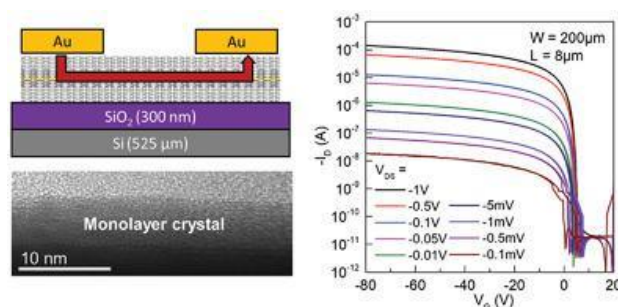


Fig. 1 The schematic structure of OFETs based on C₁₀-DNNT 2-dimensional organic crystals, the corresponding cross-sectional TEM image, and the transfer curves of the OFETs.

关键词: 有机场效应晶体管; 有机单晶; 二维单晶; 柔性电路

参考文献

- [1] B. Peng, R. Wu, H. Y. Li, Crystallization from a Droplet: Single-Crystalline Arrays and Heterojunctions for Organic Electronics. *Acc. Chem. Res.* 54, 4498-4507 (2021).
- [2] B. Peng, Z. He, M. Chen, P. K. L. Chan, Ultrahigh On-Current Density of Organic Field-Effect Transistors Facilitated by Molecular Monolayer Crystals. *Adv. Funct. Mater.* 32, 2202632 (2022).
- [3] B. Peng P. K. L. Chan, et al., Crystallized Monolayer Semiconductor for Ohmic Contact Resistance, High Intrinsic Gain, and High Current Density. *Adv. Mater.* 32, e2002281 (2020).
- [4] B. Peng P. K. L. Chan, et al., A Transfer Method for High-Mobility, Bias-Stable, and Flexible Organic Field-Effect Transistors. *Adv. Mater. Technol.* 5, 2000169 (2020).

全柔性织物显示系统

彭慧胜

复旦大学高分子科学系、先进材料实验室和聚合物分子工程国家重点实验室，邮编 200438。

*Email: penghs@fudan.edu.cn

本文主要介绍一类新型显示织物。与通常的平面结构相比，显示织物具有质量更轻、柔性更好、可高度集成等优点，并可通过纺织技术实现规模化生产，在航空、航天、军事、医学、电子等广泛领域都显示了重要的应用。

关键词： 柔性，智能，纤维，织物

参考文献

- [1] Shi, X.; Zuo, Y.; Zhai, P.; Shen, J.; Yang, Y.; Gao, Z.; Liao, M.; Wang, J.; Xu, X.; Tong, Q.; Zhang, B.; Sun, X.; Zhang, L.; Pei, Q.; Jin, D.; Chen, P.; Peng, H. *Nature* 2021, 591, 240-245.
- [2] Zhang, Z.; Cui, L.; Shi, X.; Tian, X.; Wang, D.; Gu, C.; Chen, E.; Cheng, X.; Xu, Y.; Hu, Y.; Zhang, J.; Zhou, L.; Fong, H. H.; Ma, P.; Jiang, G.; Sun, X.; Zhang, B.; Peng, H. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1800323.
- [3] Zhang, Z.; Guo, K.; Li, Y.; Li, X.; Guan, G.; Li, H.; Luo, Y.; Zhao, F.; Zhang, Q.; Wei, B.; Pei, Q.; Peng, H. *Nature Photon.* 2015, 9, 233-238.

有机激光探索

彭俊彪*，赵基臣，毛雨

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室，广州，510640

*Email: psjbpeng@scut.edu.cn

有机激光是光电领域极具挑战性的研究方向，特别是电泵有机激光的实现推动有机光电领域的发展具有重要科学意义。本报告介绍有机激光器件进展和本课题组的初步研究结果，主要介绍有机激光介质材料的设计与优化、激发态过程与能量转化、电泵器件设计与研制、以及面临的诸多问题和挑战等。

关键词：有机激光；介质材料；器件结构

参考文献

- [1] Li, Y.; Ying, S.; Zhang, X.; Xiao, S.; Zhang, D.; Qiao, X.; Yang, D.; Peng, J.; Ma, D. *J. Phys. Chem. C* **2022**, **126**: 16025.
- [2] Li, Y.; Han P.; Zhang X.; Qiao X.; Yang D.; Qin A.; Tang B.; Peng J.; Ma D. *Appl. Phys. Lett.* **2022**, **121**: 203506

有机太阳能电池关键材料与器件研究

彭强^{1,2*}

¹ 四川大学化学工程学院, 成都, 610065

² 四川大学高分子材料工程国家重点实验室, 成都, 610065

*Email: qiangpeng@scu.edu.cn

有机太阳能电池是第三代太阳能电池的典型代表, 其活性层主要由有机给体材料与富勒烯衍生物或者有机受体材料通过物理共混而制备。所以给体材料和受体材料是有机太阳能电池的关键材料, 一直是本领域的前沿热点课题。本报告中, 我们将重点汇报近年来我们面向高效率有机太阳能电池器件开展的有机给体材料和非富勒烯受体材料方面的设计合成工作, 同时探讨这些材料在单结器件、三元共混器件、顺序沉积 (L-b-L) 器件以及给受体交互异质结器件中的应用。我们的研究结果将为有机给、受体材料的分子设计以及高效器件结构设计和有机太阳能电池的进一步发展提供参考。

关键词: 有机太阳能电池; 有机给体材料; 有机受体材料; 器件结构

参考文献

- [1] Xu, X. P.; Jing, W. W.; Meng, H. F.; Guo, Y. Y.; Yu, L. Y.; Li, R. P.; Peng, Q*. *Adv. Mater.* **2023**, DIO: 10.1002/adma.202208997.
- [2] Deng, M.; Xu, X. P.; Duan, Y. W.; Yu, L. Y.; Li, R. P.; Peng, Q. *Adv. Mater.* **2023**, DIO: 10.1002/adma.202210760.
- [3] Pang, B.; Liao, C. T.; Xu, X. P.; Peng, S. Q.; Xia, J. L.; Guo, Y. Y.; Xie, Y.; Chen, Y. T.; Duan, C. H.; Wu, H. B.; Li, R. B.; Peng, Q. *Adv. Mater.* **2023**, DIO: 10.1002/adma.202211871.
- [4] Pang, B.; Liao, C.T.; Xu, X. P.; Yu, L.Y.; Li, R. P.; Peng, Q. *Adv. Mater.* **2023**, DIO: 10.1002/adma.202300631.
- [5] Chong, K. E.; Xu, X. P.; Meng, H. F.; Xue, J. W.; Yu, L. Y.; Ma, W.; Peng, Q. *Adv. Mater.* **2022**, 34, 2109516.

新型螺旋手性分子构筑单元的设计与合成

齐婷*, 屈敦帅, 李林阔

中国科学院大学, 北京市怀柔区雁栖湖校区, 101408

*Email: qiting@ucas.ac.cn

芳香酰亚胺通常作为有机半导体材料的受体构筑单元, 广泛用于有机场效应晶体管、有机发光二极管和太阳能电池等光电子器件中^[1]。受到二噻吩酰亚胺 (BTI) 和二苯酰亚胺 (BPI) 的启发, 我们设计合成了一种异构的二噻吩酰亚胺 (iBTI) 受体, 发展了区域选择性上溴的方法, 并基于此合成了 β -、 α' , β -、 α,α' -、 α,α' , β -和 α,α' , β,β' -取代的系列衍生物^[2]。同时, 具有螺旋手性的[7]类螺烯芳香酰亚胺骨架可通过iBTI的 α,α' -二芳基乙烯衍生化后经光合环形成。单晶结构分析表明酰亚胺骨架的平面性和扭曲程度可以通过 β 位取代和取代基的数目和刚性调控, 从而进一步影响化合物的光电性质。合成的[7]类螺烯芳香酰亚胺显示了良好的圆偏振发光性质, 发光不对称因子在 1×10^{-3} 。实验结果表明iBTI显示了构筑手性半导体材料的应用潜力, 并有可能应用于多功能光电子器件的构造中。



Fig. 1 Derivatization of iBTI and controllable twist of the imide backbone^[2].

关键词: 芳香酰亚胺; 手性半导体材料; 类螺烯

参考文献

[1] Qin, Y.; Li, G.; Qi, T.; Huang, H. *Mater. Chem. Front.* **2020**, *4*: 1554.

[2] Qu, D.; Li, L.; Qin, Y.; Liu, Y.; Li, G.; Qi, T.; Liu, Y. *Org. Lett.* **2023**, *25*: 938.

具有强红光发射的方酸菁 AIE 荧光探针用于次氯酸根的检测

乔伟国¹, 李忠安^{1*}¹ 华中科技大学化学与化工学院, 武汉, 430074

*Email: lizha@hust.edu.cn

作为生物体内的一种重要的活性氧 (ROS), 次氯酸 (HClO) 在机体的免疫系统中发挥着至关重要的作用。因此, 开发出高灵敏度和高选择性的HOCl/ClO⁻荧光探针具有重要意义^[1,2]。然而, 大多数的荧光探针存在着或多或少的问题, 例如在水介质中产生聚集猝灭效应 (ACQ)、发光波长短、光稳定性差、ROS选择性差及毒性高等, 从而极大地限制了其在实际场景中的应用。

方酸菁作为一类重要的菁染料, 具有独特的两性离子结构, 且具备合成简单、可见光到近红外的吸收/发射强、光稳定性好、生物毒性低等优点^[3]。然而, 这类染料结构高度平面化且具有强偶极矩, 因此分子间存在强烈的相互作用, 从而导致ACQ现象。基于此, 我们通过巧妙地结合转子结构和侧基阴离子化设计, 成功实现了方酸菁水相聚集诱导发光 (AIE), 且所得TPE-SQ5还可以作为比率型荧光探针实现对ClO⁻的高灵敏、特异性识别 (检测限: 5.6 nM)。此外, 制备的TPE-SQ5纳米粒子具有优异的生物相容性, 能够非常灵敏地检测出活细胞中的外源性和内源性的ClO⁻。

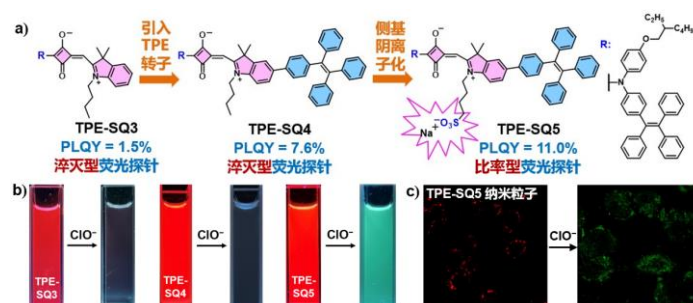


Fig. 1 Molecular design strategies of SQ-based AIEgens for ClO⁻ detection

关键词: 方酸菁; 聚集诱导发光; 次氯酸根荧光探针; 深红光细胞成像

参考文献

- [1] Qiao, W.; Ma, T.; Wang, S.; Li, L.; Liu, M.; Jiang, H.; Wu, Y.; Zhu, J.; Li, Z. A. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *45*: 2105452.
- [2] Qiao, W.; Yao, P.; Chen, Y.; Xiao, Q.; Zhang, L.; Li, Z. A. *Mater. Chem. Front.* **2020**, *4*: 2688.
- [3] He, J.; Jo, Y.; Sun, X.; Qiao, W.; Ok, J.; Kim, T.; Li, Z. A. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31*: 2105452.

气泡辅助功能材料高精度图案化

乔雅丽^{1,2*}, 闵凡一^{1,2}, 曲致远^{1,2}, 杨永瑞^{1,2}, 宋延林^{1,2*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

²中国科学院大学化学化工学院, 100049

*Email: qiaoyl@iccas.ac.cn

获得高精度的分子组装图案是功能分子器件制备和应用的前提。受自然界中气泡演化的启发, 我们提出了一种气泡模板印刷分子材料与器件的新策略, 在利用气泡模板实现高精度功能材料图案化方面开展了系统研究[1]。利用准二维气泡阵列作为模板, 实现了光电功能分子与表面活性剂双组分体系的组装与图案化, 获得了精度约80 nm的分子图案。该研究结果具有很好的普适性, 为获得高精度功能分子图案提供了一种新策略, 可广泛应用于分子器件的制备和性能研究, 并为分子自组装行为和分子间相互作用的研究提供了新技术[2,3]。进一步, 我们提出“双片段”(pi-共轭功能母核+表面活性端基)设计策略, 构筑了兼具表面活性的光电功能分子, 实现了气泡模板对单组份体系的组装与图案化, 获得了精度达亚12 nm的分子图案。总之, 我们提出了一种气泡辅助功能材料高精度图案化的新策略, 为实现柔性电子器件的制备与应用提供了理论与技术基础。

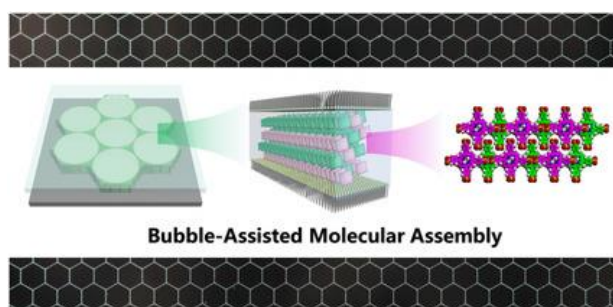


Fig. 1 A bubble-assisted method for patterning functional materials with high-precision

关键词: 气泡模板; 分子组装; 高精度图案; 光电器件

参考文献

- [1] a) Huang, Z. D.; Su, M.; Yang, Q.; Li, Z.; Chen, S. R.; Li, Y. F.; Zhou, X.; Li, F. Y.; Song, Y. L.* *Nat. Commun.* **2017**, *1*, 14110; b) Li, Z.; Huang, Z. D.; Yang, Q.; Su, M.; Zhou, X.; Li, H. Z.; Li, L. H.; Li, F. Y.*; Song, Y. L.* *Adv. Optical Mater.* **2017**, *5*, 1700751.
- [2] a) Min, F. Y.; Zhou, P.; Huang, Z. D.; Qiao, Y. L.*; Yu, C. H.; Qu, Z. Y.; Shi, X. S.; Li, Z.; Jiang, L.; Zhang, Z.; Yan, X. H.; Song, Y. L.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 16547; b) Yang, Y. R.; Min, F. Y.; Qiao, Y. L.*; Li, Z.; Vogelbacher, F.; Liu, Z. X.; Lv, W. K.; Wang, W.; Song, Y. L.* *Nano Energy* **2021**, *89*, 106384.
- [3] 曲致远; 秦靖杉; 闵凡一; 黄占东; 李正; 蔡哲仁; 乔雅丽*; 宋延林*. *中国科学:化学*, **2022**, *52(2)*, 209.

基于四苯基苯的 AIE 材料制备及其在深蓝光非掺杂 OLED 中的应用

秦安军

¹ 华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室, 广东省分子聚集发光重点实验室, 广州, 510640

Email: msqinaj@scut.edu.cn

聚集诱导发光 (Aggregation-induced emission, AIE) 是唐本忠院士于2001年提出的一个科学概念, 是指一类在溶液中发光微弱或不发光的分子在聚集态或者固态发光显著增强的现象。目前, AIE材料已经在光电、传感和生物医学等领域得到了广泛的应用, 并且显示了优于传统发光材料的特征。从分子结构角度而言, 所报道的AIE材料还主要是基于四苯基乙烯 (TPE)、多苯基取代硅杂环戊二烯 (silole)、二苯乙烯蒽等的体系。为了进一步扩展AIE领域的研究, 需要设计并制备更多的AIE分子体系并扩展其应用范围。

根据分子内运动受限的AIE机理, 在全面分析现有AIE分子体系, 特别是TPE和silole体系的优缺点基础上, 设计并制备了新型的以四苯基苯 (tetraphenylbenzene, TPB) 为核心的AIE分子体系。通过在TPB上共价连接受体基元腈基及给体基元二苯胺或者三苯胺等, 可以将TPB的发光从紫外区调控到蓝光区域。以这类基于TPB的AIE分子为发光层制备的非掺杂有机发光二极管的外量子效率可达7%以上, 且具有低的效率滚降。其原因是这类材料良好的分子取向以及高三线态激子的利用, 为设计高效的深蓝光OLED器件提供了材料基础。

关键词: 聚集诱导发光; 分子内运动受限; 四苯基苯; 非掺杂OLED

参考文献

- [1] Luo, J.; Xie, Z.; Lam, J. W. Y.; Cheng, L.; Chen, H.; Qiu, C.; Kwok, H. S.; Zhan, X.; Liu, Y.; Zhu, D.; Tang, B. Z. *Chem. Commun.* **2001**, 1740.
- [2] Han, P.; Xia, E.; Qin, A. J.; Tang, B. Z. *Coord. Chem. Rev.*, **2022**, 473, 214843

有机/无机杂化半导体激光器件

秦川江*

中国科学院长春应用化学研究所, 吉林省长春市朝阳区人民大街 5625 号, 130022

*Email: cjqin@ciac.ac.cn

有机/无机杂化钙钛矿半导体材料具有高吸收截面、高载流子迁移率、可低成本溶液加工等优点, 特别适宜用作新一代半导体激光器的增益介质。但作为一类新型发光材料, 其发光和激射原理仍未被完全揭示, 例如, 较大的激子结合能有望实现激子-极化子型激光, 进而降低激光发生阈值。此外, 实现室温连续激光是进一步开发电泵浦激光器的重要前提。然而, 已有光泵浦钙钛矿激光仅能在低温下连续激发, 在室温工作时连续激光消失, 即发生了钙钛矿激光领域面临的“激光死亡”问题, 并且导致激光消失的原因未知。针对上述国际难题, 我们在证实了Rashba自旋效应和暗态三线态激子存在的基础上, 率先提出并证明了准二维钙钛矿中长寿态的三线态激子抑制了粒子数反转, 是导致“激光死亡”的本质原因。通过维度和组分工程调控钙钛矿增益介质中三线态激子, 同时开发了高品质因子谐振腔提供光学回馈, 率先实现了系列具有低激发阈值的室温连续光泵浦准二维钙钛矿激光。

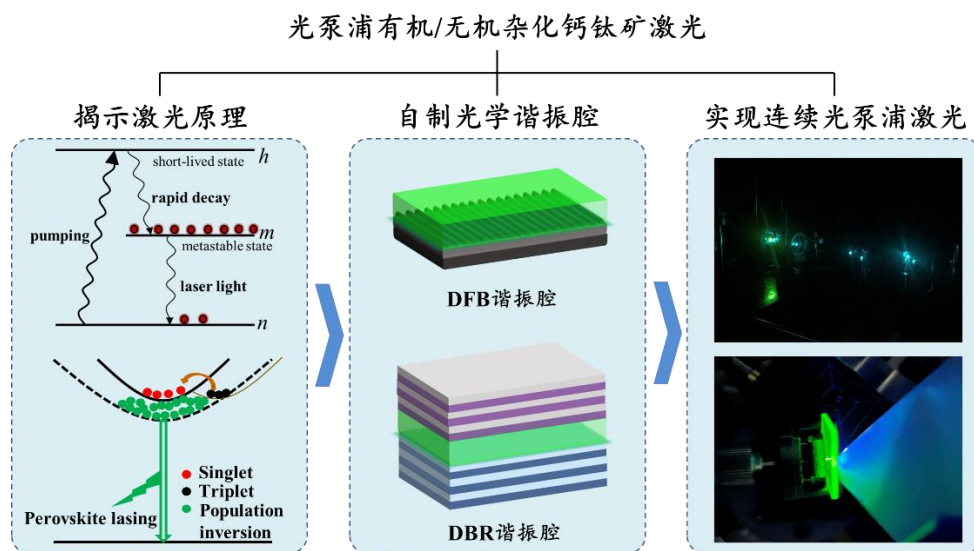


Fig. 1 Outline of our perovskite lasers

关键词: 有机/无机杂化材料; 半导体激光; 发光二极管; 钙钛矿增益介质

参考文献

- [1] Qin, C.; et al. *Nature* **2020**, *585*: 53.
- [2] Qin, C.; et al. *Nature Photonics* **2020**, *14*: 70.
- [3] Gao, X.; Qin, C.; et al. *J. Phys. Chem. Lett.* **2023**, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.3c00279

反射/荧光双重模式胆甾相液晶的图案化

秦朗^{1,*}, 刘晓璐¹, 崔淑贞¹, 俞燕蕾^{1,*}

¹复旦大学材料科学系, 聚合物分子工程国家重点实验室, 上海, 200433

²工作单位, 地址, 邮编

*Email: qinlang@fudan.edu.cn; ylyu@fudan.edu.cn

胆甾相液晶具有周期性螺旋结构, 能够选择性地反射不同波长的光产生无角度依赖的结构色, 在传感器、激光器、反射式显示和光学防伪等领域具有广阔的应用前景。近年来, 具有荧光性质的液晶材料引起了人们的关注。然而, 已报道的具有荧光性质的液晶均为本体发光材料, 在室温下不为向列相, 无法被手性分子扭曲形成胆甾相。本工作中, 我们将荧光性质引入胆甾相液晶中, 开发了反射颜色可变、荧光性质稳定的胆甾相液晶微球“双色墨水”^[1]。我们设计了一种与液晶结构相似、量子效率高的荧光材料, 以避免传统荧光分子在液晶中溶解性差和聚集导致荧光猝灭(ACQ)的问题。具有荧光性质的向列相液晶主体在手性分子的作用下形成胆甾相。进一步, 我们利用毛细管微流控技术将荧光胆甾相液晶制备成尺寸均一的单乳液微球(□170 μm)。在表面活性剂的作用下, 微球内液晶分子排列成三维光子晶体结构, 其呈现出无角度依赖的结构色, 并且保留了稳定的荧光性质。基于该“双色”微球构筑的图案在反射和荧光模式下携带完全不同的信息。作为概念验证, 将荧光二维码隐藏在多彩的反射图案中, 实现了防伪信息的加密。这种结合了由两种机理产生的结构色和荧光色的胆甾相液晶微球为保护真实信息提供了一种新的防伪材料, 有望提高防伪力度并推动防伪技术领域的发展。

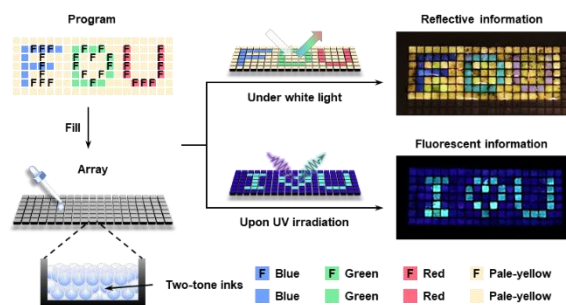


Fig. 1 Design of the geminate label programmed by cholesteric liquid crystal microdroplets with structural color and fluorescent color and photographs of the resulting label in reflective and fluorescent states.

关键词: 液晶; 光子晶体; 荧光

参考文献

[1] Qin, L.; Liu, X.; He, K.; Yu, G.; Yuan, H.; Xu, M.; Li, F.; Yu, Y. *Nat. Commun.* **2021**, *12*: 699.

可光编程的圆偏振光探测器

邱龙臻^{1,*}, 张灿¹, 王晓鸿¹

¹合肥工业大学, 光电技术研究院, 安徽省合肥市屯溪路 193 号, 230009

*Email: lzhqiu@hfut.edu.cn

圆偏振光 (CPL) 的检测在量子计算、自旋光通信、磁记录和 3D 显示等领域展现出广泛的应用前景, 已经引起了科学界和工业界的广泛关注。然而, 传统的圆偏振光电探测器依赖于线偏振片和四分之一波片等光学元件, 在制备可调圆偏振探测应用的微型化和集成化器件的过程中遇到了巨大的挑战。在该工作中, 我们以 CPL 诱导的聚(9,9-二正己基芴-alt-苯并噻二唑) (F6BT) 薄膜和聚(3-己基噻吩) (P3HT) 薄膜构成的异质结制备了可光学编程圆偏振光探测器。该器件的 CPL 敏感层的 optical activity 可以通过 CPL 光调制, 从而实现对 L-CPL 和 R-CPL 的可切换检测。由于 F6BT 层与 P3HT 层之间构成的平面异质结结构, CPL 光电探测器表现出良好的光电性能和对 L-CPL 与 R-CPL 更好的选择性响应, 最大响应度和不对称因子可达 2.76 A/W 和 0.425。进一步制备了 3×3 的基于 F6BT/P3HT 异质结的 CPL 光电探测器阵列, 分别在 L-CPL 和 R-CPL 照射下呈现出不同的图案, 表明这种可光学编程圆偏振光探测器在光子学、成像和防伪方面具有广泛的应用前景。

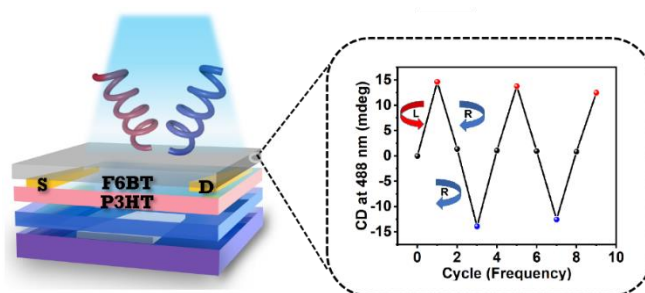


Fig.1 Circularly polarized light programs the optical activity of F6BT sensitive layer.

关键词: 手性光电子; 手性有机半导体; 光电晶体管; 不对称因子; 圆偏振光探测器

参考文献

- [1] Zhang, C.; Xu, C.; Chen, C.; Cheng J, Zhang, H.; Ni, F.; Wang, X. Ni, F.; Zou, G*; Qiu L*. *ACS Nano*. **2022**, **16**: 12452-12461.
- [2] Xue, Y[†]; Zhang, C[†]; Lv, T.; Qiu, L*; Wang, F*. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, **62**: e202300972.

具有可控扭曲骨架的异构双噻吩酰亚胺(iBTI)受体的合成与衍生

屈敦帅¹, 李林阔¹, 秦媛媛¹, 刘彦伟², 李国平³, 齐婷^{1,*}, 刘云圻²

¹ 中国科学院大学, 北京, 101408

² 中国科学院化学研究所, 北京, 100190

³ 郑州大学, 郑州, 450001

*Email: qiting@ucas.ac.cn

本课题组成功合成了一种七元环异构化双噻吩酰亚胺(iBTI)受体。通过控制溴化位点可以得到一系列 β -, α',β -, α,α' -, α,α',β - 和 $\alpha,\alpha',\beta,\beta'$ - 取代衍生物。单晶分析表明, 亚胺骨架的扭转角取决于 β 位取代基的数量和刚性。此外, 基于iBTI的四取代和[7]螺烯衍生物的螺旋手性在手性半导体材料的构建中显示出巨大的前景。



Fig. 1 The torsion angle of the iBTI backbone increases with the number of β -position substituents.

关键词: 异构化; 受体; 溴化; 衍生化; 螺烯。

参考文献

[1] Qu, D.; Li, L.; Qin, Y.; Liu, Y.; Li, G.; Qi, T.; Liu, Y. *Org. Lett.* **2023**, *25*: 938–943.

2D-COF 节点扭曲调制策略用于可编程长余辉发射

邵明超^{1, 2}, 刘云圻^{1, 2}, 郭云龙^{1, 2*}

¹中国科学院化学研究所北京市分子科学国家实验室, 北京 100190

²中国科学院大学, 北京 100049

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn

可控的层间堆叠, 可溶剂加工和长余辉发光一直是二维共价有机框架 (2D-COF) 开发中的挑战。我们提出了一种扭曲节点调制策略来同时解决这些问题。节点扭曲类型的一致性导致堆叠样式变得不可调整: 重叠堆叠 (非扭曲节点) 和倾斜堆叠 (扭曲节点)。通过将扭曲和非扭曲节点交替引入 2D-COFs 系统, 首次实现了重叠和倾斜堆叠之间的可逆晶体转变。倾斜堆叠的 COF 可以很容易地剥离成纳米片, 以便进行溶液处理。将剥离的纳米片限制在聚甲基丙烯酸甲酯内, 实现了第一个可编程的长余辉发光, 用于书写、打印以及成像、防伪和应急照明。这项工作为设计具有不同堆叠的 2D-COF 提供了一种新颖的策略, 以解决新功能应用难以加工的挑战。

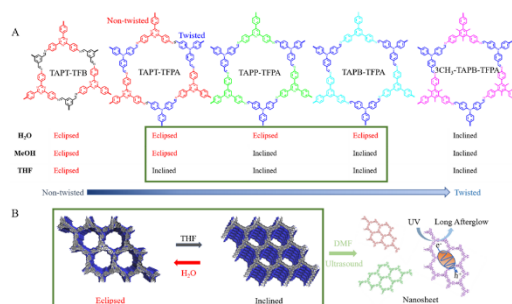


Fig. 1 Twisted node modulation of 2D-COFs. (A) Structures and stacking style of hexagonal COF assembly with different twisted nodes. (B) Reversible crystal interconversion, solution processability nanosheets and long afterglow luminescence of exfoliated nanosheet.

关键词: 2D-COF; 层间堆积; 节点扭曲; 溶液加工; 长余辉。

参考文献

- [1] Shao, M.; Zhang, Q.; Wei, X.; Chen, J.; Gao, W.; Liu, G.; Kuang, J.; Bian, Y.; Wang, C.; Liu, Y.; Qin, M.; Yue, J.; Wang, D.; * Guo, Y.; * Liu, Y. *Cell Reports Physical Science*. **2023**, *4*:101273.

宏观超分子组装及其应用

石峰

北京化工大学, 北京, 100029

*Email: shi@mail.buct.edu.cn

宏观超分子组装是指在微米以上的宏观构筑基元表面引入超分子识别基团, 再利用宏观界面组装构筑体相超分子材料的过程。它是超分子化学的新兴研究方向, 为体相超分子材料的制备提供了新的思路。自2011年宏观超分子组装的概念提出以来, 国内外研究团队的工作多停留在现象描述阶段, 尚未对宏观界面间超分子基团的相互作用机制和组装机理展开深入研究, 为此, 我们针对“什么样的构筑基元可以发生宏观组装?”以及“如何实现宏观构筑基元的精准组装”两大基本问题展开研究, 在国际上较早开展了微米及以上尺度构筑基元“宏观超分子组装”方面的研究, 主要包括以下内容: (1) 系统地研究了构筑基元的表面性质对组装过程的影响, 阐明了“具有高柔顺性表面是宏观构筑基元的基本设计原则, 基于上述设计原则提出“柔性间隔层”的概念, 通过在难以组装的刚性构筑基元表面引入高流动性涂层作为柔性间隔层, 实现了普适性的宏观组装, 从而验证和推广了该设计原则; (2) 首次提出了基于动态组装-解组装的自纠错策略, 解决了组装过程对出错不敏感的问题, 实现了平行、精准的宏观超分子组装; (3) 基于宏观超分子组装生物相容性好、组装条件温和的优点, 实现了宏观超分子组装在生物材料和传感领域的应用, 为基于超分子组装构筑体相超分子材料提供了新方法和新思路。

关键词: 超分子材料; 宏观超分子组装; 柔顺性表面; 精准组装

参考文献

- [1] Tan, M.; Tian, P.; Zhang, Q.; Zhu, G.; Liu, Y.; Cheng, M.; Shi, F. *Nat. Commun.*, **2022**, **13**, 5201.
- [2] Ju, G.; Cheng, M.; Guo, F.; Zhang, Q.; Shi, F. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, **57**, 8963-8967.
- [3] Cheng, M.; Zhu, G.; Li, L.; Zhang, S.; Zhang, D.; Kuehne, A.; Shi, F. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, **57**, 14106-14110.
- [4] Ju, G.; Guo, F.; Zhang, Q.; Kuehne, A.; Cui, S.; Cheng, M.; Shi, F. *Adv. Mater.*, **2017**, **29**, 1702444.
- [5] Cheng, M.; Shi, F.; Li, J.; Lin, Z.; Xiao, M.; Zhang, L.; Yang, W.; Nishi, T. *Adv. Mater.*, **2014**, **26**, 3009-3013.

交替共轲聚合物的精准合成

张猛，文轩，谢文斌，史钦钦*，黄辉

¹ 中国科学院大学，北京怀柔区，100432

*Email: shiqinqin@ucas.ac.cn

共轲聚合物具有优异的光电性能，是柔性电子发展的材料基础。但功能性共轲聚合物的合成手段远远落后于传统聚合物材料，其主要问题在于合成方法的局限性，因此开发共轲聚合物的合成新方法，将解决制约材料应用的关键问题，并提出新知识，新理论。我们通过改变反应单体，调节反应条件，减少自偶联副反应，调控了分子竞争反应势垒，实现了交替聚合物的结构的精准调控。近期，我们开发基于C-S键活化的新型聚合方法，CASP-Suzuki，以及CASP-DArP，制备的聚合物相比传统方法制备的聚合物，具有更加精准的结构、更好的结晶程度、更低的缺陷态密度、和更高的载流子迁移率。一定程度上提高了材料制备的批次重现性和材料的稳定性。体现了我们合成方法的优越性。

关键词： 聚合合成方法；精准合成；共轲聚合物

参考文献

- [1] Z. Li, Q. Shi, X. Ma, Y. Li, K. Wen, L. Qin, H. Chen, W. Huang, F. Zhang, Y. Lin, T. J. Marks, H. Huang, *Nature Communications* **2022**, *13*, 144.
- [2] B. Ma, Q. Shi, X. Ma, Y. Li, H. Chen, K. Wen, R. Zhao, F. Zhang, Y. Lin, Z. Wang, H. Huang, *Angewandte Chemie International Edition* **2022**, *61*, e202115969.
- [3] 马博维，史钦钦，黄辉，*高分子学报*，2023，DOI: 10.11777/j.issn1000-3304.2022.22432.

n-型全受体聚合物的设计、合成及性能研究

史永强^{1,*}

¹安徽师范大学 化学与材料科学学院, 芜湖, 241002

*Email: shiyq@ahnu.edu.cn

高性能n-型有机半导体材料对于有机电子领域的发展不可或缺, 其中n-型聚合物材料大多采用给体-受体(donor-acceptor)结构, 但是给体单元的引入容易造成聚合物呈现p-型或者双极型。为了获得纯n-型特性, 全受体(Acceptor-Acceptor或all-acceptor)结构是较为理想的解决方案, 其在实现单极性n-型有机薄膜晶体管方面有显著优势。发展n-型有机半导体主要依靠新颖的缺电子构建单元, 然而高度缺电子受体单元在合成上有很大的挑战, 由于合成挑战和同时拉电子基团带来的空间位阻, 缺电子的n-型有机半导体材料非常稀缺, 这种材料鲜有报道。相对于富电子噻吩单元, 噻唑是缺电子单元, 并且减小了空间位阻, 通过分子内S...N非共价键相互作用, 增加了聚合物骨架的平面性(图1), 使聚合物具有更低的前沿轨道能级, 这种全受体聚合物PDTzTI在晶体管里面表现N-型性能, 电子迁移率为 $1.61 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 很低的漏电流 10^{-10} - 10^{-11} A 和高的开关比 10^7 - 10^8 。该聚合物PDTzTI作为电子传输层完全取代PCBM在钙钛矿电池里面, 得到的最高能量转化效率PCE = 20.86%。而且, 这种全受体聚合物在有机热电领域也得到了很好的应用, 掺杂之后得到的电导率达到 34 S cm^{-1} , 功率因子为 $15.7 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。

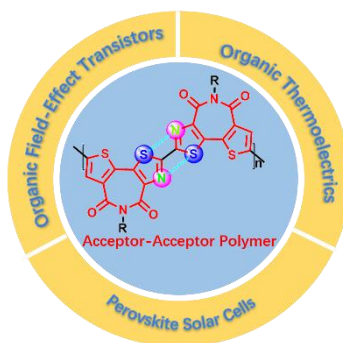


Fig. 1 The imide-functionalized n-type all-acceptor polymer applied in organic field-effect transistors (OFETs), organic thermoelectrics (OTEs), and perovskite solar cells (PVSCs).

关键词: 噻唑酰亚胺; 全受体聚合物; 有机场效应晶体管; 有机热电; 钙钛矿太阳能电池

参考文献

- [1] Shi, Y*., Li, J., Sun, H*., Li, Y., Wang, Y., Wu, Z., Jeong, S., Woo, H., Fabiano, S*., Guo, X*., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e202214192.
- [2] Shi, Y., Guo, H., Huang, J., Zhang, X., Wu, Z., Yang, K., Zhang, Y., Feng, K., Woo, H Y., Ortiz, R. P*., Zhou, M*., Guo, X*., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, 59, 14449-14457.
- [3] Shi, Y., Guo, H., Qin, M., Zhao, J., Wang, Y., Wang, H., Wang, Y., Facchetti, A., Lu, X., Guo, X*., *Adv. Mater.*, 2018, 30, 1705745.

有机/高分子聚集体的光电性质理论研究

帅志刚

清华大学化学系, 北京, 100084

*Email: zgshuai@tsinghua.edu.cn

高分子和有机聚集体的基本特征是结构的柔性、分子间的弱作用以及较多的无序/杂质, 导致电子态的局域化和电子关联, 传统的能带理论无法准确描述这类材料。电子的关联效应会使得单/三态的交换能大, 从而导致电致发光的内量子效率受限于25%, 同时使得光生激子的束缚能较大 (0.4 - 0.6 eV, 尽管有利于发光, 但不利于光伏)。我们从理论上提出采用谐振腔结构, 是一种实现超过25%内量子极限的可能途径[1]。朱凌云、易院平等最近发现, 通过分子设计, 给受体聚合物电池材料内, 界面附近的极化能大幅减小激子的束缚能, 尤其是新型非富勒烯受体Y6具有极好的极化功能[2]。

结构的柔性带来的强烈的电声子耦合, 这就是高分子中导电的孤子和极化子的起源。尽管导电高分子的发现已近50年, 导电机理却一直存有争议, 2000年的诺奖公告中采用局域化电荷的跳跃模型解释高分子中的导电机制, 但随后的一系列实验却表明跳跃模型无法解释电导率的低温平台, 并且基于跳跃模型给出的迁移率系统地低估实验结果。我们提出了量子核隧穿模型来描述有机/高分子中的电荷传输现象[3]。该理论得到随后的一批实验证实。

我们还发现, 高分子所特有的极化子特征会导致奇异的热电响应塞贝克效应, 即随着温度升高, 塞贝克系数会出现先上升然后下降的行为, 这是因为掺杂诱导的极化子能带与导带之间出现热激发改变占据所引起的[4, 5], 很好地解释了实验结果。

关键词: 激子束缚能; 核隧穿模型; 电荷迁移率; 有机热电; 有机发光理论

参考文献

- [1] Ou, Q.; Shao, Y. H.; Shuai, Z. G. *J Am Chem Soc.* **2021**, **143**: 17786.
- [2] Zhu, L. Y.; Zhang, J. Q.; Guo, Y.; Yang, C.; Yi, Y. P.; Wei, Z. X. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 15348.
- [3] Geng, H.; Peng, Q.; Wang, L. J.; Li, H. J.; Liao, Y.; Ma, Z. Y.; Shuai, Z. G. *Adv. Mater.* **2012**, **24**: 3568.
- [4] Liu, Y. P.; Shi, W.; Zhao, T. Q.; Wang, D.; Shuai, Z. G. *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, **10**: 2493.
- [5] Ge, Y. F.; Liu, R.; Shuai, Z. G. *Appl. Phys. Lett.* **2021**, **118**: 123301.

四噻吩有机光伏受体材料

宋金生*

¹河南大学纳米材料工程研究中心, 开封, 475004

*Email: songjs@henu.edu.cn

有机太阳能电池相关器件的光电转换效率已经突破19%，其性能的不不断提升极大地得益于新材料体系的不断研发。(寡)聚噻吩类材料由于其优异的电荷传输能力，是一类重要的有机半导体材料，被广泛地应用于有机太阳能电池和有机薄膜晶体管等领域。同时，其结构简单，合成难度低，且非常好的商业化应用前景。(寡)聚噻吩类材料在有机光伏的给受体材料中均展现出了良好的光伏特性，本课题组长期致力于噻吩共轭功能材料的研究，(1)将易于自聚集的茚二酰亚胺(PDI)单元与非平面的马鞍形“环八四噻吩”进行相结合，有效地抑制了分子自身团聚，实现了良好的活性层形貌的调控，其as-cast薄膜即获得了较高的光电转化效率^[1]；(2)在线型“四联噻吩”中间构筑位阻型侧链，有效地调控了其分子排列方式和聚集行为，获得了高性能完全非稠合受体分子，有望解决有机光伏的实际应用中制备成本及材料合成工艺复杂的问题^[2]。总之，环状、线性四噻吩的分子设计为有机光电材料的分子聚集、形貌调节以及实现高性能光伏器件提供了一种有效分子的设计思路和构筑基元。

关键词：环八四噻吩；四联噻吩；有机光伏；非富勒烯受体

参考文献

- [1] M. Li, L. Yang, Y. Zhou, Y. Liu, J. Song*, H. Wang*, Z. Bo*, Flexible–Rigid Synergetic Strategy for Saddle-Shaped Perylene Diimide Acceptors in As-Cast Polymer Solar Cells. *J. Phys. Chem C*, **2021**, 125, 10841.
- [2] Y. Zhou, M. Li, H. Lu, H. Jin, X. Wang, Y. Zhang, S. Shen, Z. Ma, J. Song* and Z. Bo*, High-Efficiency Organic Solar Cells Based on a Low-Cost Fully Non - Fused Electron Acceptor. *Adv. Funct. Mater.*, **2021**, 31, 2101742

利用工艺助剂定向精准调控 BTP 系列受体及其 有机太阳能电池研究

宋欣^{1*}, 朱卫国¹

¹材料科学与工程学院, 常州大学, 常州, 213164

*Email: xin.song@cczu.edu.cn

通常太阳能电池效率由短路电流、填充因子和开路电压三个参数共同决定。活性层的互传网络状结构决定了短路电流和填充因子参数。因此, 活性层材料的选择及优化工艺从根本上决定了器件效率。目前, 在给受体共混物中通过分子结构的调控、添加第三组分或者添加剂是优化活性层形貌最主要的方式。但是, 分子结构的调控会增加合成及材料纯化的成本; 第三组分的引入虽然会提高效率¹, 但是选择何种第三组分目前还处于争议之中。另外, 高沸点添加剂的引入会导致器件稳定性的明显降低。所以, 上述手段大大限制了有机太阳能电池的大规模推广应用²。

因此, 需要一种简单易操作的形貌优化手段, 以弥补现有技术存在的缺陷。在本项目中, 1, 3-2 溴-5-氯苯 (DBCl) 被选为工艺助剂, 精确调控BTP系列受体的结晶性能及聚集状态, 利用DBCl固体易升华及卤素分布非对称特性, 增强BTP系列受体的偶极作用及形成多层次异质结形貌, 从而明显提高电荷传输及收集效率, 获得18.5%的光电转换效率³。

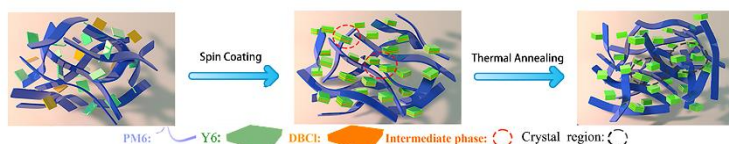


Fig. 1 Schematical images of our Process-Aid Solid Engineering

关键词: 有机太阳能电池; BTP受体; 形貌; 结晶

参考文献

- [1] X. Song, N. Gasparini, M. M. Nahid, S. Paleti, J. Wang, H. Ade, D. Baran *Joule* **2019**, *3*, 846–857.
- [2] X. Song, P. Sun, D. Sun, Y. Xu, Y. Liu, W. Zhu *Nano Energy* **2022**, *91*, 106678.
- [3] X. Song, K. Zhang, R. Guo, K. Sun, Y. Liu, W. Zhua, P. Müller-Buschbaum *Adv. Mater.*, **2022**, DOI:10.1002/adma.20220907.

纳米绿色印刷光电器件

宋延林

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: ylsong@iccas.ac.cn

基于纳米材料制备及功能墨滴图案化的基础科学问题的研究, 利用纳米结构材料构建浸润性差异的表面, 发展了系统的纳米绿色印刷技术[1]; 深入研究了印刷技术基本单元“点、线、面、体”精细控制的关键科学技术问题, 实现了精准可控的微纳结构和光电器件的印刷制备[2]。基于聚合物乳胶纳米颗粒的大规模制备与自组装精细控制, 实现了光子晶体涂层材料的图案化制备, 并发展了一系列高性能的光学传感和检测器件[3], 推动高效光电器件、高灵敏生物检测等领域的研究与应用。

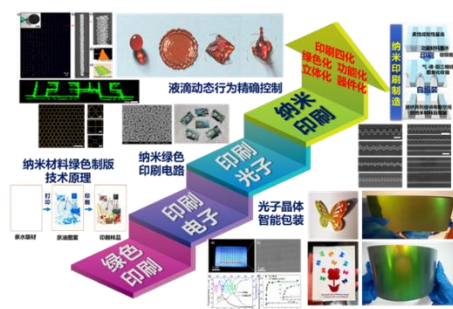


Fig. 1 Green Printing Technology and Photoelectric Device Fabrication

关键词: 纳米绿色印刷; 微纳结构; 光电器件

参考文献

- [1] a) M. Su, Y. Song, Chem. Rev. **2022**, **122**, 5144. b) J. Jiang, B. Bao, Y. Song, et al, Adv. Mater. **2016**, **28**, 1420-1426.
- [2] a) M. Kuang, L. Wang, and Y. Song, Adv. Mater. **2014**, **26**, 6950-6958. b) Y. Huang, J. Wang, Y. Song, et al, J. Am. Chem. Soc. **2012**, **134**, 17053-17058. c) B. Su, C. Zhang, Y. Song, et al, Adv. Mater. **2014**, **26**, 2501-2507. d) M. Su, F. Li, Y. Song, et al, Adv. Mater., **2017**, **29**, 1605223. e) M. Su, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2020**, **59**, 14234. f) K. Li, Y. Song, et al, Sci. Adv. **2021**, **7**, eabh1992.
- [3] Y. Huang, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, **52**, 7296; b) J. Hou, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2014**, **53**, 5791; c) M. Qin, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2016**, **55**, 7025; d) D. Guo, Y. Song; et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2017**, **56**, 15348. e) D. Guo, Y. Song, et al., J. Am. Chem. Soc. **2018**, **140**, 18. f) J. Hou, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2018**, **57**, 2544. g) Q. Pan., Y. Song, et al., Adv. Mater. **2020**, **32**, 1907280. f) Z. Zhang, Y. Song, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **2021**, **60**, 24234

有机金属分子材料的限域发光与偶合

苏成勇，潘梅

中山大学化学学院, 广州市海珠区新港西路 135 号, 51027

*Email: cessay@mail.sysu.edu.cn

有机金属材料 (Metal-organic materials) 作为一种具有空间集成、匹配协同与动态转换特性的分子组装和性能应用平台, 通过了丰富的多路径光子吸收、转换和能量传递机制, 从而有望获得优于各简单功能基元本身的可控复合、叠加与可调发光性能。近年来, 我们系统研究了有机金属分子发光材料的多路径光子上/下转换发光过程和能量传递机制, 分别获得了具有单/双/多光子长余辉、白光、压变发光、上转换发光等新颖、高效、多元化光学功能的有机金属新材料体系, 为显示、防伪、传感、生物成像等不同领域的应用提供了新的思路。

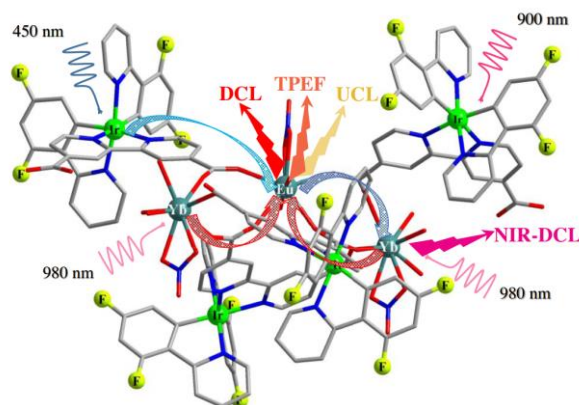


Fig. 1 Energy transfer pathways in multifunctional metal-organic materials

关键词: 有机金属新材料, 光子转换, 能量传递

参考文献

- [1] Z. Wang, C.-Y. Zhu, J.-T. Mo, X.-Y. Xu, J. Ruan, M. Pan, C.-Y. Su. Multi - mode Color - tunable Long Persistent Luminescence in Single Component Coordination Polymers. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 2526-2533.
- [2] M. Pan, W.-M. Liao, S.-Y. Yin, S.-S. Sun, C.-Y. Su. Single-Phase White-Light-Emitting and Photoluminescent ColorTuning Coordination Assemblies. *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 8889–8935.

纳米印刷智能材料器件

苏萌^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: sumeng1988@iccas.ac.cn

近年来, 印刷微纳制造在建立新的制造原理和方法、发展纳米制造新工艺与新装备, 以及推动纳米器件从实验室原型走向产业化应用领域研究方面获得了重要进展。针对印刷微纳制造结构规整性差、构筑面积小、精度较低的局限和影响印刷精度咖啡环效应、马拉格尼效应、瑞利失稳等关键科学难题, 调控纳米印刷墨滴蒸发过程中多种物理过程, 发现液滴浸润行为与功能材料可控组装的关系与规律, 实现基本单元高精度印刷制备。[1] 面向智能微纳感知需求, 印刷制备了表情识别与皮肤微操纵传感芯片; [2]利用微纳编织多角度传感器实现了全身运动定量识别; [3]制备了超高精度柔性光电传感器和目前最高密度的全印刷存储器件; [4]研发多种可印刷钙钛矿墨水材料, 实现高通量印刷制造柔性太阳能电池; [5]与中国人民解放军总医院合作, 将基于印刷周期结构的新型纳米光学检测方法用于新冠病毒、流感病毒的超灵敏检测, [6]并研制新型生物探针材料, 用于脑胶质瘤细胞10分钟快速成像, [7]建立了印刷智能材料与器件应用体系。

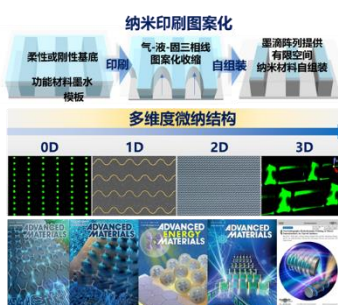


Fig. 1 Nano printing smart materials-based devices and applications.

关键词: 纳米印刷; 智能材料; 光电传感; 生物检测

参考文献

- [1] Su, M. et al. *Chemical Reviews*, DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00303; Su, M. et al. *Science Bulletin*, 2021, 66(3): 250-256; *Angewandte Chemie-International Edition*, 2020, 59(34): 14234-14240.
- [2] Su, M. et al. *Advanced Materials*, 2016, 28(7): 1369-1374.
- [3] Su, M. et al. *Advanced Materials Technologies*, 2018, 3(8): 1800107.
- [4] Su, M. et al. *Advanced Optical Materials*, 2020, 8(15): 2000370; Su, M. et al. *Advanced Electronic Materials*, 2019, 5(5): 1900131.
- [5] Su, M. et al. *Advanced Energy Materials*, 2021, 11(34): 2101291
- [6] Su, M. et al. *Angewandte Chemie-International Edition*, 2021, 60(45): 24234-24240.
- [7] Su, M. et al. *Advanced Optical Materials*, DOI: 10.1002/adom.202101835.

纯有机室温电致磷光

李梦珂, 陈子健, 邱伟栋, 苏仕健*

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室, 广州五山, 510640

*Email: mssjsu@scut.edu.cn

纯有机材料由于缺乏重金属, 通常表现出较弱的自旋-轨道耦合效应, 其三线态的产生和直接辐射跃迁是自旋禁阻的。这将导致系间交叉较慢, 三线态寿命较长, 磷光量子产率较低。我们新开发了一系列的纯有机化合物, 即使在不定形薄膜下仍存在单线态和三态间强的自旋-轨道耦合。除了硫和硒原子的重原子效应增强了自旋-轨道耦合效应外, 其给体-受体骨架利于轨道角动量变化, 并进一步促进了自旋-轨道耦合效应。刚性分子结构还可以抑制严重的非辐射能量耗散。得益于强的自旋-轨道耦合效应, 基于该系列分子成功制备了高效的非掺杂和掺杂纯有机磷发光二极管。

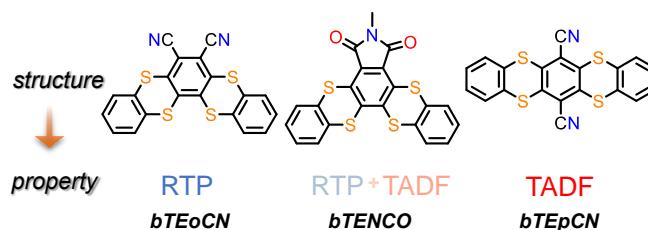


Fig. 1 Typical compounds and their changeable optoelectronic properties.

关键词: 纯有机室温磷光; 三线态激子; 电致发光; 有机发光二极管

参考文献

- [1] Qiu, W.; Cai, X.; Chen, Z.; Wei, X.; Li, M.; Gu, Q.; Peng, X.; Xie, W.; Jiao, Y.; Gan, Y.; Liu, W.; Su, S.-J. *J. Phys. Chem. Lett.* **2022**, *13*: 4971.
- [2] Li, M.; Xie, W.; Cai, X.; Peng, X.; Liu, K.; Gu, Q.; Zhou, J.; Qiu, W.; Chen, Z.; Gan, Y.; Su, S.-J. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202209343.

无铅卤化物钙钛矿光电突触器件的研究

孙昌族¹, 刘天华¹, 罗利平¹, 王煦¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京市怀柔区, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

有机无机杂化钙钛矿材料具有组成可设计, 性能可调控, 可低温制备以及制备柔性器件等优异条件。近些年来已经逐步成为光电突触器件的研究热点, 但是传统的铅基钙钛矿材料对生态环境有严重危害, 商业化应用也收到了限制。一种有效的方案就是开发无铅钙钛矿新的光电突触器件。我们的工作在前期的无铅钙钛矿光伏和光电探测器的研究基础上, 充分利用无铅钙钛矿独特的离子动力学特性, 调控光生载流子的捕获和释放, 构筑低能耗全光调控的光电突触器件, 将其应用于生物电子技术等领域, 在近期的工作中, 以低毒的Sn、Bi、Sb和Ti等金属元素取代钙钛矿结构中的Pb, 制备具有全光调控的突触器件, 并改变入射光的自由度(频率、偏振、模式指数、强度、统计、相干性等), 全部利用外界光信号驱动模拟突触功能, 简化器件操作方式, 降低能耗, 最终实现无铅钙钛矿器件在神经形态器件领域的应用。无铅钙钛矿光电突触研究仍处于起步阶段, 从材料的设计、基本元器件的构筑、功能调控到集成应用均存在广阔的研究空间。

关键词: 无铅卤化物钙钛矿; 多功能光电器件; 光电突触

参考文献

- [1] X. Meng*, Y. Li, Y. Qu, H. Chen, N. Jiang, M. Li, D. J. Xue, J. S. Hu*, H. Huang*, S. Yang *, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, **60**: 3693-3698.
- [2] X. Meng, Y. Wang, J. Lin, X. Liu, X. He, T. Wu, T. Noda, X. Yang*, L. Han*, *Joule*, **2020**, **4**: 902- 912.

多孔骨架复合物材料激发态调控和光催化活性研究

孙春义^{1*}, 苏忠民²

¹ 东北师范大学, 吉林省长春市人民大街 5268 号, 130024

² 吉林大学, 吉林省长春市前进大街 2699 号, 130024

*Email: suncy009@nenu.edu.cn

基于多孔金属氧簇材料的孔道限域效应, 调控金属配合物的激发态, 用于光催化 C-C/C-N 形成: (1) 调控 Au(III) 配合物的激发态, 实现长寿命 Au(III) 配合物在空气条件下高效磷光发射, 并用于高效、高选择性光催化 C-C/C-N 键形成反应。相比于均相的 Au(III) 配合物催化剂, Au(III)@多孔金属氧簇复合物材料展现出了更高效的催化活性, 更长的催化使用寿命以及无可比拟的可循环性和基于底物尺寸的选择性催化行为。(2) 诱导 Pt(III) 配合物产生新的 ³MMLCT 激发态, 并用于光催化系列脱氢反应实现 C-C/C-N 键构筑。相比与均相的 Pt(III) 配合物, 催化剂 Pt(III)@多孔金属氧簇复合物材料可催化的底物范围更广, 反应类型更加丰富, 拓宽了 Pt(III) 配合物光催化脱氢反应的活性范围。

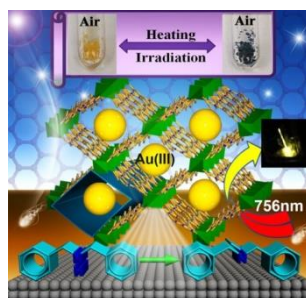


Fig. 1 金配合物@多孔骨架激发态调控和光催化C-N耦联。

关键词: 多孔骨架; 磷光材料; 金配合物

参考文献

[1] Sun, C.Y.; To, W.P.; Wang, X.L.; Chan, K.T.; Su Z.M.; Che C. M. *Chem. Sci.* **2015**, *6*: 7105.

双噻吩酰亚胺基 n-型高分子光伏材料

孙会靓 ^{1,2*}

¹ 广州大学, 广州市番禺区广州大学城外环西路 230 号, 510006

² 南方科技大学, 深圳市南山区学苑大道 1088 号, 475001

*Email: Huiliang@gzhu.edu.cn

有机半导体是当今材料化学领域的前沿课题, 具有重要的商业应用价值。由于有机电子器件中普遍存在的p-n结和互补电路, n-型有机/高分子半导体对有机电子器件不可或缺。相比p型材料, n-型高分子在材料设计与合成、分子能级和聚集态结构调控等方面的巨大挑战, 使得n-型高分子材料种类少且性能明显滞后, 限制了高性能器件和电路的发展, 亟需加快n-型高分子半导体材料创制方面的突破。本次报告将介绍n-型高分子半导体材料的发展以及报告人在新型双噻吩酰亚胺衍生物化学创制及其n-型高分子半导体材料的设计与合成方面的研究工作。重点介绍新型n-型高分子半导体材料在有机光伏电池中的应用。

关键词: n-型高分子半导体; 有机太阳能电池

参考文献

- [1] Sun, H.; Tang, Y.; Koh, C. W.; Ling, S.; Wang, R.; Yang, K.; Yu, J.; Shi, Y.; Wang, Y.; Woo, H. Y.; Guo, X. *Adv. Mater.* **2019**, *31*, 1807220.
- [2] Sun, H.; Yu, H.; Shi, Y.; Yu, J.; Peng, Z.; Zhang, X.; Liu, B.; Wang, J.; Singh, R.; Lee, J.; Li, Y.; Wei, Z.; Liao, Q.; Kan, Z.; Ye, L.; Yan, H.; Gao, F.; Guo, X. *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 2004183.
- [3] Luo, Z.; Liu, T.; Ma, R.; Xiao, Y.; Zhan, L.; Zhang, G.; Sun, H.; Ni, F.; Chai, G.; Wang, J.; Zhong, C.; Zou, Y.; Guo, X.; Lu, X.; Chen, H.; Yan, H.; Yang, C. *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 2005942.
- [4] Sun, H.; Liu, B.; Ma, Y.; Lee, J.-W.; Yang, J.; Wang, J.; Li, Y.; Li, B.; Feng, K.; Shi, Y.; Zhang, B.; Han, D.; Meng, H.; Niu, L.; Kim, B. J.; Zheng, Q.; Guo, X. *Adv. Mater.* **2021**, *31*, 2102635.
- [5] Li, B.; Zhang, X.; Wu, Z.; Yang, J.; Liu, B.; Liao, Q.; Wang, J.; Feng, K.; Chen, R.; Woo, H. Y.; Ye, F.; Niu, L.; Guo, X.; Sun, H. *Science China Chemistry* **2022**, *65*, 1157-1163.

染料敏化太阳能电池器件模拟与染料分子设计

孙磊, 邓伟侨*

山东大学, 山东省青岛市滨海路 72 号, 266237

*Email: dengwq@sdu.edu.cn

染料敏化太阳能电池是制造高效、柔性光伏器件的重要候选之一。我们基于多尺度模拟方法, 发展了染料敏化太阳能电池器件模型, 实现从染料分子到电池光电效率的定量预测【1】。在微观尺度, 利用密度泛函理论方法模拟染料分子物理化学性质, 结合微观状态方程获取电池相关参数; 在介观尺度, 构建与实验匹配的纳米多孔二氧化碳光阳极结构, 结合染料分子尺寸确定有效吸附面积, 并利用随机行走方法模拟其中电荷传输性能; 在宏观尺度, 利用微观与介观模拟获得的参数、求解电池运行状态方程。利用这一器件模型开发了新型高效锌卟啉染料分子, 对比YD2-o-C8染料分子, 在相同实验条件下, 提高了25%的光电转换效率。除此之外, 我们利用所发展的预测模型, 研究了吸收光波长及分子尺寸对染料敏化太阳能电池性能的影响, 确定了如何进一步提高电池效率的研究方向。此项工作为染料敏化太阳能电池的大规模筛选工作提供了非经验的定量预测模型。

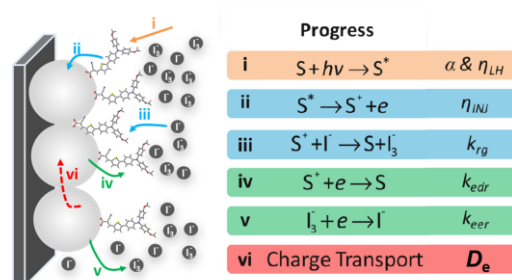


Fig. 1 The fundamental processes and main parameters in the model.

关键词: 染料敏化太阳能电池; 器件模型; 染料分子; 多尺度模拟

参考文献

- [1] Sun, L.; Jiang, L.; Liu, X.; Deng, W.Q.; In Silico Prediction and Design of Dye-Sensitized Solar Cells. In Computational Materials, Chemistry, and Biochemistry: From Bold Initiatives to the Last Mile: In Honor of William A. Goddard's Contributions to Science and Engineering, Shankar, S.; Muller, R.; Dunning, T.; Chen, G. H., Eds. Springer International Publishing: Cham, 2021, 645-677.

高效自旋输运型有机半导体研究

孙向南

国家纳米科学中心，中关村北一条 11 号，邮编 100190

*Email: sunxn@nanoctr.cn

有机半导体通常由碳、氢、氧等轻元素构成，其自旋-轨道耦合作用较弱，因此理论上具有远超其他材料的自旋寿命（可达秒量级，无机材料通常低于纳秒），被认为是开展室温、高效自旋输运研究和实现自旋电子应用的理想材料。但不幸的是，有机自旋电子学中目前展现的室温自旋输运效率、自旋寿命、输运距离都比较低下，远低于理论预期值。

针对上述问题，我们近期开发了熔融型自旋输运材料，通过对聚集态缺陷的控制，实现了自旋输运效率的突破；提出了“元素趋同”的材料设计新理念，有效地消除了堆积自旋弛豫，极大地提高了材料的室温自旋寿命；开展了基于有机单晶体系的自旋电子学研究，优化了自旋输运过程，实现了最长的室温自旋输运距离。

关键词： 有机自旋电子学；有机半导体；自旋输运；室温

参考文献

- [1] Y. Zhu[#], L. Guo[#], J. Guo[#], X. Sun^{*}, Z. Tang^{*} et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, **62**, e202213208.
- [2] Y. Qin[#], X. Gu[#], X. Sun^{*} et al., *Nano Today*, **2023**, **49**, 101763.

高性能全聚合物太阳能电池研究

孙艳明^{1,*}

¹北京航空航天大学, 北京市海淀区学院 37 号, 100190

*Email: sunym@buaa.edu.cn

近年来, 随着非富勒烯受体小分子材料的快速发展, 有机太阳能电池的光电转换效率不断取得突破。然而, 小分子受体材料存在易结晶, 光热稳定性以及拉伸性能差等缺点, 与之相反, 聚合物受体材料可以弥补小分子受体材料的这些不足, 所制备的全聚合物太阳能电池具有优异的稳定性和机械柔韧性, 在可穿戴以及柔性可拉伸器件方面具有较大的潜力。全聚合物体系因其溶液黏度高, 流平性能好, 非常适用于大面积印刷器件的制备。因此, 全聚合物太阳能电池在商业应用上更具优势。尽管全聚合物体系具有诸多优点, 但是目前全聚合物太阳能电池研究较少, 性能也偏低。本报告将系统介绍我们课题组最近在全聚合物太阳能电池方面的研究进展, 包括高性能聚合物受体材料设计, 全聚合物体系形貌调控, 器件稳定性研究以及绿色大面积加工等方面内容。

关键词: 太阳能电池; 全聚合物体系; 效率; 稳定性

参考文献

- [1] Li, Yun; Song, Jiali; Dong, Yicai; Jin, Hui; Xin, Jingming; Wang, Shijie; Cai, Yunhao; Jiang, Lang; Ma, Wei; Tang, Zheng; Sun, Yanming, *Adv. Mater.* **2022**, *34*, 2110155.
- [2] Li, Yun; Li, Qian; Cai, Yunhao; Jin, Hui; Zhang, Jianqi; Tang, Zheng; Zhang, Chunfeng; Wei, Zhixiang; Sun, Yanming, *Energy Environ. Sci.* **2022**, *15*, 3854.
- [3] Song, Jiali; Li, Yun; Cai, Yunhao; Zhang, Rui; Wang, Shijie; Xin, Jingming; Han, Lili; Wei, Donghui; Ma, Wei; Gao, Feng; Sun, Yanming, *Matter* **2022**, *5*, 4047.
- [4] Cai, Yunhao; Xie, Cong; Li, Qian; Liu, Chunhui; Gao, Jiaxin; Jee, Min Hun; Qiao, Jiawei; Li, Yun; Song, Jiali; Hao, Xiaotao; Woo, Han Young; Tang, Zheng; Zhou, Yinhua; Zhang, Chunfeng; Huang, Hui; Sun, Yanming, *Adv. Mater.* **2023**, *35*, 2208165.

分子基反铁电体的设计合成与性能研究

孙志华

中国科学院福建物质结构研究所，福建省福州市海西高新区科技园，350002

*Email: sunzhihua@fjirsm.ac.cn

反铁电体一类特殊电介质材料，其相邻晶胞内偶极子反平行排布，在施加电场时能够转变为平行一致排列。基于电场驱动的反铁电相—铁电相转变过程，该类材料在高效储能电容器、换能器以及非线性元件等方面具有广泛应用前景。在前期工作基础上，我们系统开展了反铁电分子材料的化学合成与性能研究，利用降低骨架维度的策略，结合异价金属阳离子替代方法 ($M^+M^{3+} = 2M^{2+}$)，制备新颖的二维双钙钛矿反铁电分子化合物；进一步通过骨架调控和组分修饰，将偶极基元有序化和骨架原子位移两种机制协同，增强微观相邻晶格间的相互作用，获得相变温度高、极化强度大的反铁电分子材料；在此基础上，尝试开展了该类材料在固态储能/制冷等方面的探索研究，以期研制具有高储能效率、室温以上宽工作温区的分子基候选反铁电材料，为推动环境友好型分子材料的固态储能应用提供助力。

关键词：反铁电体；分子化合物；结构设计；固态制冷

参考文献

- [1] Han, S.; Liu, X.; Liu, Y.; Xu, Z.; Li, Y.; Hong, M.-C.; Luo, J.-H.; Sun, Z.-H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, **141**: 12470-12474.
- [2] Xu, Z.; Liu, X.; Li, Y.; Liu, X.; Yang, T.; Ji, C.; Han, S.; Xu, Y.; Luo, J.-H.; Sun, Z.-H.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, **58**: 15757-15761.
- [3] Li, M.; Han, S.; Liu, Y.; Hong, M.-C.; Luo, J.-H.; Sun, Z.-H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2020, **2021**, **142**: 20744-20751.
- [4] Xu, H.; Guo, W.; Wang, J.; Ma, Y.; Han, S.; Liu, Y.; Lu, L.; Pan, X.; Luo, J.-H.*; Sun, Z.-H.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, **143**: 14379-14385.
- [5] Xu, H.; Guo, W.; Ma, Y.; Liu, Y.; Hu, X.; Hua, L.; Han, S.; Liu, X.; Luo, J.-H.*; Sun, Z.-H.*, *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 5329.

纳米器件界面修复与增韧

谈利承^{1*}, 杨嘉¹, 盛旺平¹, 钟杨¹, 苏洋¹, 李佳璇², 陈义旺^{1,2*}

¹ 南昌大学化学化工学院/高分子及能源化学研究院, 江西省南昌市学府大道 999 号, 330031

² 江西师范大学高等研究院, 江西省南昌市紫阳大道 99 号, 330022

*Email: tanlicheng@ncu.edu.cn; ywchen@ncu.edu.cn

自2009年钙钛矿作为吸光材料应用于太阳电池以来, 能量转换效率不断取得突破, 已从最初的3.8%提高到25.5%, 与单晶硅电池相当。然而, 器件的耐弯折性和稳定性差仍限制其在柔性可穿戴设备领域的实际应用。本研究团队针对钙钛矿太阳电池的离子迁移、水氧侵蚀和机械弯折导致的稳定性问题, 提出“穿针引线”策略全面提高钙钛矿太阳电池的稳定性和耐弯折性。提出了碳纳米管、含氟半导体、有机上转换分子以及AIE分子等填补钙钛矿晶界缺陷, 抑制了离子迁移, 大幅提高器件的光热稳定性^[1-6]。率先提出了聚氨酯弹性体修复钙钛矿晶界缺陷和实现晶界连接, 赋予活性层耐弯折性^[7]。仿造爬藤植物生长原理, 开发了一种通过在碘化铅中散布原位自聚合甲基丙烯酸甲酯(sMMA)构建的新型自组装纵向支架, 将钙钛矿溶液限制在有机网络内, 并提供更高效的成核位点以促进晶体沿支架纵向生长。此外, sMMA低聚物能够在钙钛矿薄膜退火过程中进一步聚合并填充钙钛矿晶界, 以形成能够钝化缺陷, 释放机械应力, 抑制离子迁移和水/氧渗透的交联网络, 从而提高器件的操作稳定性和耐弯折性^[8]。通过贻贝仿生交联氧化物纳米晶抑制界面反应降低电压损失, 克服无机界面层固有的脆性并赋予界面粘结性, 提高钙钛矿太阳电池的弯折稳定性^[9,10]。提出了自密性高分子封装钙钛矿界面层, 阻止了水氧对钙钛矿层的侵蚀, 引入EVA胶合界面层, 有效地改善钙钛矿太阳电池的长期稳定性、阻水性以及弯曲耐久性, 从而制备出刚性和柔性的25 cm²太阳电池模组^[11,12]。

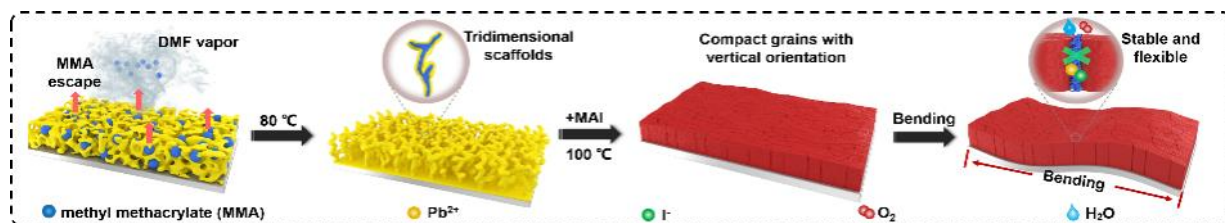


Fig. 1 Controlling crystal growth via autonomously longitudinal scaffold for planar perovskite solar cells.

关键词: 钙钛矿太阳电池; 稳定性; 缺陷; 修复; 增韧

参考文献

- [1] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Energy Mater.* **2019**, 9 (18): 1900198. Back Cover, ESI Highly Cited Paper.
- [2] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Energy Environ. Sci.* **2021**, 14 (6), 3532-3541.
- [3] Licheng Tan*, Zhen Li*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Funct. Mater.* **2019**, 29 (18): 1808059. Inside Front Cover.
- [4] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61 (5), e202114588.
- [5] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Funct. Mater.* **2022**, DOI: 10.1002/adfm.202109631.
- [6] Licheng Tan*, Qianqian Lin*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Energy Mater.* **2022**, DOI: 10.1002/aenm.202103652.
- [7] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Funct. Mater.* **2017**, 27 (41): 1703061. Inside Front Cover.
- [8] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Mater.* **2020**, 32 (26): 20200061.
- [9] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Energy Mater.* **2022**, DOI: 10.1002/aenm.202103674.
- [10] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Chem. Eng. J.* **2022**, 431, 134235.
- [11] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Funct. Mater.* **2019**, 29(37): 1902629.
- [12] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *Adv. Funct. Mater.* 32 (1), 2105917.

基于 SnO₂ 阴极界面材料的反向结构有机太阳电池

谭占鳌*, 于润楠, 高怀志

北京化工大学 北京软物质科学与工程高精尖创新中心, 北京市朝阳区北三环东路 15 号, 100029

*Email: tanzhanhao@mail.buct.edu.cn

有机太阳电池 (OSC) 因重量轻、效率高、可大面积柔性制备等特点而备受关注。OSC 的典型器件结构由两层界面层夹一层本体异质结活性层而组成。氧化锡 (SnO₂) 因具有高透光性、高电子迁移率、更合适的能级, 是用于反向结构 OSC 的理想电子收集材料。我们采用直接沉淀法合成了 SnO₂ 纳米粒子, 并将其用作电子收集层 (ECL), 表现出优异的厚度容忍性。采用刮刀涂布厚度高达 530 nm 的 SnO₂ ECL, 基于 PM6:Y6 的器件效率仍高达 12.08%^[1]。然而, SnO₂ 表面存在大量羟基和氧空位缺陷, 导致电荷复合。我们将电解质 4-(二甲基(吡啶-2-基)铵)丁烷-1-磺酸盐 (PAS) 以适当的比例掺杂到 SnO₂ 薄膜中, 可以提高倒置 OSC 的性能。PAS 可以与 SnO₂ 薄膜中的 Sn 原子配位以减少表面缺陷, 从而产生可调节的功函数和增加的电子电导率。同时, PAS 掺杂可以降低 SnO₂ 层的表面能, 形成活性层的垂直相分布, 有利于更好的激子离解和电荷传输^[2]。进一步, 我们采用多位点配位策略, 通过设计并引入葱醌衍生物 (1-DPAQ) 来钝化 SnO₂ 的表面缺陷。我们发现 1-DPAQ 的改性可以优化功函数并提高 SnO₂ 层的电导率。此外, 系统的理论分析和表征表明, SnO₂ 和 1-DPAQ 之间存在稳定的配位作用, 填补了 SnO₂ 的氧空位。1-DPAQ 有效抑制电荷复合, 同时提高电荷收集能力。除了实现二元和三元活性层的 17.7% 和 18.1% 的高效率外, 器件还表现出显著提高的稳定性^[3]。

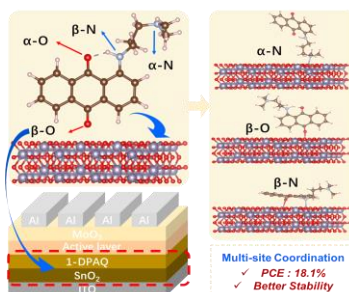


Fig. 1 Efficient interface modification via multi-site coordination for improved efficiency and stability in organic solar cells

关键词: 氧化锡; 电子收集层; 有机太阳电池; 反向结构

参考文献

- [1] Bai, Y.; Zhao, C.; Zhang, S.; Zhang, S.; Yu, R.; Hou, J.; Tan, Z.; Li, Y. *Sci. China Chem.* **2020**, *63*, 957-965.
- [2] Gao, H.; Wei, X.; Yu, R.; Cao, F.; Gong, Y.; Ma, Z.; Cheng, Y.; Hsu, C.; Tan, Z. *Adv. Optical Mater.* **2022**, *10*, 2102031.
- [3] Yu, R.; Wei, X.; Wu, G.; Zhang, T.; Gong, Y.; Zhao, B.; Hou, J.; Yang, C.; Tan, Z. *Energy Environ. Sci.*, **2022**, *15*, 822-829.

新型延迟荧光材料设计及白光应用

谢凤鸣¹, 邹世界¹, 曾馨逸¹, 李昊泽², 李艳青², 唐建新^{1,*}

¹苏州大学功能纳米与软物质研究院, 江苏省苏州市工业园区仁爱路199号, 邮编215123

²华东师范大学物理与电子科学学院, 上海市闵行区东川路500号, 邮编200241

*Email: jxtang@suda.edu.cn

纯有机热激活延迟荧光(TADF)材料由于分子设计灵活并且其内量子效率可达100%, 易于实现高效全光色发射。通过结合苯腈和多重吡啶成功得到了蓝光和绿光TADF分子, 异供体和外围叔丁基的包覆策略抑制了聚集诱导淬灭现象, 提高了纯膜的量子产率, 基于2tCz2CzBn的非掺杂蓝光器件实现了最大EQE为21.6%, 开启电压低至2.7 V, 发射峰为470 nm [1]; 基于SFO-SPAC的非掺杂绿光器件最大EQE为23.5% [2]。结合刚性大共轭二苯并[a,c]吩嗪受体和多个吡啶供体得到了红光TADF分子DPPZ-DMAC的最大EQE高达27.8%, 应用于白光器件的EQE达到30.1% [3]。融合手性源和红光TADF分子得到一对手性对映体(R/S)-ODPPXZ, 基于(R/S)-ODPPXZ的器件实现了圆偏振发光, 最大EQE为20.3%, 不对称因子(g_{EL})为 2.4×10^{-3} [4]。

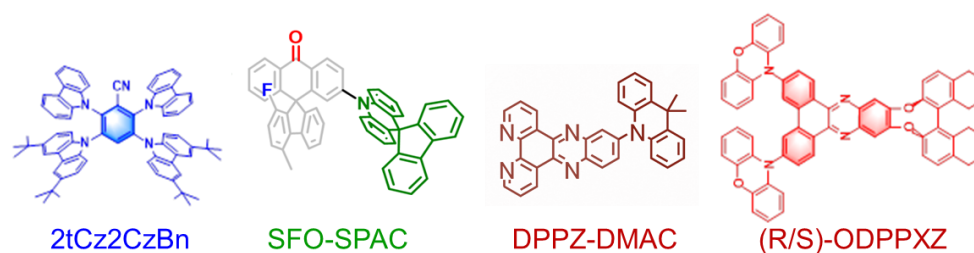


Fig. 1 RGB TADF materials.

关键词: 有机发光二极管; 延迟荧光; 白光

参考文献

- [1] S.-J. Zou, F.-M. Xie, M. Xie, Y.-Q. Li, T. Cheng, X.-H. Zhang, C.-S. Lee, J.-X. Tang, *Adv. Sci.* **2020**, *7*, 1902508.
- [2] H.-Z. Li, F.-M. Xie, K. Zhang, Y. Shen, W. Zhou, Y.-Q. Li, W.-J. Wang, J.-X. Tang, *Chem. Eng. J.* **2022**, *436*, 135234.
- [3] X.-Y. Zeng, J.-X. Zhou, S.-J. Zou, Y.-Q. Tang, H.-Z. Li, Y.-H. He, Y.-Q. Li, W.-J. Wang, J.-X. Tang, *Adv. Optical Mater.* **2022**, *10*, 2200277.
- [4] F.-M. Xie, J.-X. Zhou, X.-Y. Zeng, Z.-D. An, Y.-Q. Li, D.-X. Han, P.-F. Duan, Z.-G. Wu, Y.-X. Zheng, J.-X. Tang, *Adv. Optical Mater.* **2021**, *9*, 2100017.

极限探测用卤化物晶体生长及探测性能研究

陶绪堂*, 张国栋

山东大学晶体材料国家重点实验室, 济南, 250100

*Email: txt@sdu.edu.cn

对电磁波的探测是人类认知世界的主要方式。目前, 对可见光的探测已发展比较成熟, 在极弱光条件下即可以呈现清晰的彩色图像, 表现出高灵敏度、高分辨率和光谱分辨的特点。然而, 对于长波红外探测以及短波的 X 射线和 γ 射线探测, 要实现上述性能还存在一些挑战。对于红外探测, HgCdTe 热成像探测器对伪装目标或特征差异小的物体难以分辨, 主要是缺乏实用的红外分光材料和器件; 而对于 X 射线和 γ 射线探测, 亟需开发新型的高性能低成本半导体辐射探测单晶。本团队根据“红外”和“核辐射”探测两个极限波段对材料的应用需求, 长期开展具有“极限探测”性能的金属卤化物的晶体生长工作, 主要包括具有透光范围宽、双折射大、声速低、声光优值大的卤化亚汞 (Hg_2X_2 , $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$) 系列晶体^[1]和吸收系数大、载流子传输性能优异的全无机钙钛矿系列晶体(CsPbBr_3 、 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 等)^[2-4]。本文将报告我们团队关于红外滤光用声光晶体卤化亚汞和辐射探测用卤化物钙钛矿的晶体生长及探测性能的研究结果。

关键词: 卤化物晶体, 红外探测, X 射线探测, 晶体生长

参考文献

- [1] Lin Liu, Rongzhen Li, Yanxiao Bi, Sheng-Qing Xia, Guodong Zhang*, Xutang Tao*, *Crystal Growth & Design*, 2021, 21:7034
- [2] Peng Zhang, Yunqiu Hua, Xiang Li, Longzhen Zhang, Lin Liu, Rongzhen Li, and Guodong Zhang*, Xutang Tao* *Advanced Materials*, 2022, 2106562
- [3] Longzhen Zhang, Lin Liu, Peng Zhang, Rongzhen Li, Guodong Zhang*, Xutang Tao*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2020, 12: 39834
- [4] Fucui Cui, Peng Zhang, Longzhen Zhang, Yunqiu Hua, Xue Sun, Xiang Li, Guodong Zhang*, Xutang Tao*, *Chemistry of Materials*, 2022, 34(21): 9601

基于螺吡喃衍生物的有机固态荧光光开关

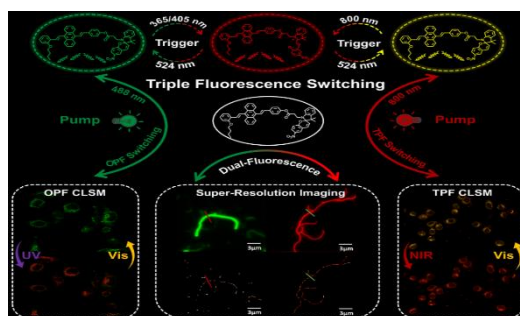
田文晶

吉林大学化学学院超分子结构与材料国家重点实验室，长春，130012

Email: wjtian@ju.edu.cn

固态荧光光开关材料能够在外界特定波长光的照射下实现颜色和荧光强度、荧光颜色等性质的可逆变化，因而在防伪涂料、光学信息存储介质、生物成像荧光探针和超分辨成像染料等领域展现出巨大的应用价值，受到了广泛关注。有机固态荧光光开关材料已经取得了令人瞩目的研究进展，但在聚集态中分子的排列方式和分子间的相互作用复杂多样，不可控的聚集态分子结构会导致其光致异构过程及发光性质不稳定。因此，发展固态荧光光开关新材料体系，认识和理解分子聚集态结构与发光性能的关系，实现其崭新功能，对于有机固态荧光光开关的开发和应用具有非常重要的意义。

我们将结构高度扭曲的具有聚集诱导发光性质的 9, 10-二苯乙烯基蒽 (DSA) 和四苯基乙烯 (TPE) 分子与螺吡喃连接，使分子在聚集态有足够的自由空间，因而分子中的螺吡喃部分能够光异构化，实现了高效的固态荧光光开关。在此基础上，我们利用 9-对羟基苯乙烯基-10-邻正丁醚基苯乙炔基蒽 (BOSA-OH) 和螺吡喃对不同波长的光响应机制的不同，设计合成了一种新型固态荧光光开关 BOSA-SP，用不同波长的“泵浦光”成功实现了红、绿、黄三种荧光颜色的稳定输出，利用不同波长的“触发光”实现了绿-红，黄-红之间的荧光颜色的可控切换。



“泵浦-触发”光学调控固态有机分子实现可逆三色荧光切换

参考文献:

- [1] Qi Q. K., Li C., Liu X. G., Jiang S., Xu Z. C., Lee R., Zhu M. Q., Xu B., Tian W. J., *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, 139, 16036-16039.
- [2] Yang R.Q., Jiao Y., Wang B.Y., Xu B., Tian W. J., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2021, 12, 1290-1294.
- [3] Yang R.Q., Ren X., Mei L.J., Pan G.C., Li X. Z., Wu Z. Y., Zhang S., Ma W. Y., Yu W. L., Fang H. H., Li C., Zhu M. Q., Hu Z., Sun T. M., Xu B., Tian W. J., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, e202117158.

高效率高稳定性有机光伏器件与模组制备研究

李师彤, 张树超, 刘建, 陈新, 万相见* 陈永胜*

南开大学, 天津市卫津路 94 蒙民伟楼, 邮编 300071

*Email: xjwan@nankai.edu.cn

近年来, 随着活性层材料的发展以及器件工艺的进步, 有机太阳能电池光电转换效率不断刷新。然而, 目前多数高效率的有机光伏器件的稳定性较差, 而稳定性较好的器件的效率又偏低。如何获得高效率与高稳定性材料与器件是有机光伏领域面临的重要挑战。我们以提升有机太阳能电池的光电转换效率与稳定性为目标, 设计发展了系列活性层和界面层材料体系, 获得了高效率高稳定性的器件和模组。我们设计合成了一种新型的氧化锌有机修饰层 (NMA), 基于ZnO/NMA, 获得了效率超过18%且光照稳定性T80寿命大于7000h的光伏器件。进一步, 我们设计了具有扩展共轭中心和长支链侧链的受体CH7, 采用绿色溶剂邻二甲苯制备了活性层面积为25.2 cm²的大面积模组, 模组的效率为14.42%。经MPP追踪测试, 该模组具有良好的光稳定性, 光老化500 h后仍保持初始效率的93%; 在氮气氛围65°C持续加热500 h, 仍能维持初试效率的83%。

关键词: 有机太阳能电池; 效率; 稳定性

参考文献

- [1] Shitong Li, Qiang Fu, Lingxian Meng, Xiangjian Wan*, Liming Ding, Guanyu Lu, Guanghao Lu, Zhaoyang Yao, Chenxi Li, Yongsheng Chen*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, *61*, e202207397.
- [2] Shuchao Zhang, Hongbin Chen, Peiran Wang, Shitong Li, Zhixiang Li, Yuzhong Huang, Jian Liu, Zhaoyang Yao, Chenxi Li, Xiangjian Wan*, Yongsheng Chen*, *Solar RRL*, **2023**, 2300029

三维共价有机框架材料

汪成^{1,*}, 桂波², 林桂庆¹

¹ 武汉大学化学与分子科学学院, 湖北省武汉市武昌区八一路, 430072

*Email: chengwang@whu.edu.cn

共价有机框架 (Covalent Organic Frameworks, COFs) 是一类新型的有机多孔材料, 具有结构规整、孔道均一等特点, 在气体吸附与分离、催化、传感、光电功能器件、能源等方面展现出诱人的应用前景格外引人关注^[1]。当前, COFs领域研究重点主要集中在二维COFs, 而关于三维COFs的研究报道比较少^[2]。究其原因, 主要是三维COFs的合成难度大、结构解析困难、可供选择的四面体节点稀缺等。在过去的几年中, 我们针对这些问题展开了研究。本报告中, 将介绍我们在三维COFs的研究进展: 通过合理的前体设计并选择合适的连接方式, 提出了由【4+4】构筑三维COFs的拓扑设计新策略^[3]; 进一步, 利用连续旋转电子衍射技术, 首次在原子水平确定了三维COFs粉晶样品结构^[4]; 在此基础上, 定向构筑了一系列三维COFs并进行性质研究^[5]。

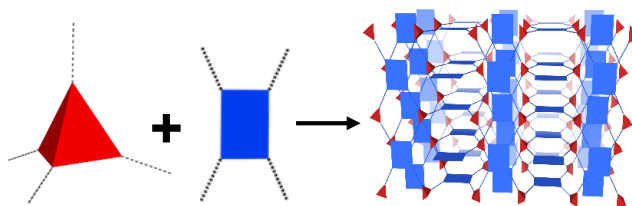


Fig. 1 Our topology design for synthesizing 3D COFs

关键词: 共价有机框架; 三维; 拓扑设计; 结构表征

参考文献

- [1] Ding, S.-Y.; Wang, W. *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*: 548.
- [2] (a) Diercks, C. S.; Yaghi, O. M. *Science* **2017**, *355*: 923. (b) Gui, B.; Lin, G.; Ding, H.; Gao, C.; Mal, A.; Wang, C. *Acc. Chem. Res.* **2020**, *53*: 2225 ; c) Gui, B.; Ding, H.; Cheng, Y.; Mal, A.; Wang, C. *Trends Chem.* **2022**, *4*: 437.
- [3] (a) Lin, G.; Ding, H.; Yuan, D.; (a) Wang, B.; Wang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*: 3302. (b) Lin, G.; Ding, H.; Chen, R.; Peng, Z.; Wang, B.; Wang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*: 8705. (c) Ding, H.; Li, J.; Xie, G.; Lin, G.; Chen, R.; Peng, Z.; Yang, C.; Wang, B.; Sun, J.; Wang, C. *Nat. Commun.* **2018**, *9*: 5234.
- [4] (a) Gao, C.; Li, J.; Yin, S.; Lin, G.; Ma, T.; Meng, Y.; Sun, J.; Wang, C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*: 6430. (b) Gao, C.; Li, J.; Yin, S.; Sun, J.; Wang, C. *Nat. Commun.* **2020**, *11*: 4919.
- [5] (a) Meng, Y.; Shi, J.-L.; Ding, H.; Lang, X.; Chen, W.; Zheng, A.; Sun, J.; Wang, C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*: 3624. (b) Gao, C.; Li, J.; Yin, S.; Sun, J.; Wang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 3718. (c) Liu, X.; Li, J.; Gui, B.; Lin, G.; Fu, Q.; Yin, S.; Liu, X.; Sun, J.; Wang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*: 2123. (d) Xie, Y.; Li, J.; Lin, C.; Gui, B.; Ji, C.; Yuan, D.; Sun, J.; Wang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*: 7279.

酰亚胺功能化的分子碳

王朝晖

清华大学化学系

* E-mail: wangzhaohui@mail.tsinghua.edu.cn

分子碳是具有确定原子组成和化学结构的分子基纳米碳，对揭示碳纳米材料结构性能的构效关系具有重要意义。从2006年开始，我们研究团队基于独特、多样性的核心稠环结构-莱啉（Rylene）酰亚胺经典单元，利用边缘串联耦合策略，构建了丰富的酰亚胺功能化的分子碳材料库，包括一维碳纳米带酰亚胺、二维纳米石墨烯酰亚胺以及跨维度分子碳酰亚胺等。这类分子基纳米碳家族的新成员，具有合成灵活、结构可定制、性能多样、加工性能和稳定性优异等特点，对结构的创新、新奇物理化学性质的探索以及新材料性能的挖掘具有重要意义。

关键词：分子碳；芳酰亚胺；精准合成；功能调控

参考文献

1. Wei Jiang and Zhaohui Wang*, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 14976-14991.
2. Ningning Liang, Dong Meng and Zhaohui Wang*, *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*, 961-975.
3. Wei Jiang, Yan Li, and Zhaohui Wang*, *Acc. Chem. Res.* **2014**, *47*, 3135-3147.

爱丁堡仪器稳态瞬态荧光产品高端附件耦合及应用

王晨晨

天美仪拓实验室设备（上海）有限公司，上海，201620

E-mail:wangchenchen@techcomp.cn

荧光光谱测试技术在分子光谱领域有着广泛的应用，先进的荧光光谱测试技术能够更精准的得到材料的光物理以及光学性质，从而进一步阐述分子发光机理。荧光光谱仪在此过程中扮演着重要的角色，光源、电子元件以及检测器都影响着荧光光谱的测试结果，并且在光化学合成、发光材料、荧光探针及生物成像、超分子光化学、生物光化学等光功能材料领域有着不同的测试需求，至此对于光谱仪不仅要求先进的光学组件，也必须兼容不同的附件从而满足不同的测试需求。此报告阐述了爱丁堡多种高端附件在分子光谱领域的应用。

关键词：爱丁堡，稳态瞬态，分子光谱，高端附件

高导电性共轭配位聚合物材料

王成亮*

华中科技大学，武汉市珞喻路 1037 号，430074

*Email: clwang@hust.edu.cn

有机高分子材料的本征导电性通常较差。而利用 π -d共轭的共轭配位聚合物材料因具有良好的导电性在众多应用领域得到了广泛关注。但该类材料的结构不清晰，在不同文献中还存在着各种争议，配体的选择种类也比较有限，限制了该类材料及其应用的发展。在此情况下，我们通过合成控制，获得聚合物的单晶，并利用电化学反应过程中的材料价态及结构变化，深入研究了该类材料的结构，揭示了该类材料的理想结构及化学态，并在此基础上获得了高性能储能新器件。

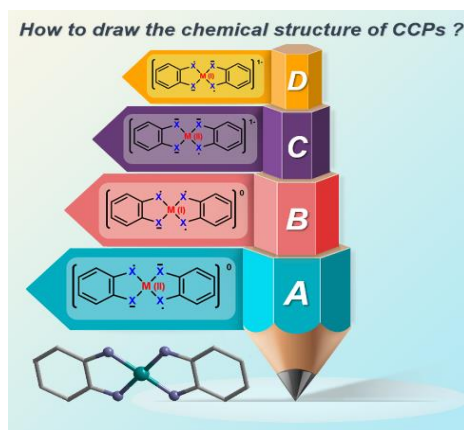


Fig. 1 CCPs and their applications in batteries

关键词：共轭配位聚合物材料；导电MOFs；金属有机框架；有机储能材料；二次电池

参考文献

- [1]. **Wang, C.***, et al. The chemical states of conjugated coordination polymers. *Chem* 2021, 7, 1224.
- [2]. **Wang, C.***, et al. A one-dimensional π -d conjugated coordination polymer for sodium storage with catalytic activity in Negishi coupling. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 14731.
- [3]. **Wang, C.***, et al. Successive Storage of Cations and Anions by Ligands of π -d Conjugated Coordination Polymers Enabling Robust Sodium-ion Batteries. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 18769.
- [4]. **Wang, C.***, et al. Framework Dimensional Control Boosting Charge Storage in Conjugated Coordination Polymers, *Adv. Sci.* 2023, 10, 2205760.
- [5]. **Wang, C.***, et al. Heterochelation boosts sodium storage in π -d conjugated coordination polymers. *Energy Environ. Sci.* 2021, 14, 6514.
- [6]. **Wang, C.***, et al. A Highly Conductive Conjugated Coordination Polymer for Fast-Charge Sodium-Ion Batteries: Reconsidering its Structures, *Chem. Commun.* 2019, 55, 10856.

用于超灵敏电生理信号的低压本征可拉伸有机晶体管放大器

王成斌^{1,2}, 刘凯^{1,2}, 刘博文³, 蒋琛^{3,*}, 刘云圻^{1,2}, 郭云龙^{1,2,*}

¹中国科学院化学研究所有机固体重点实验室, 北京市, 100190

²中国科学院大学化学科学学院, 北京市, 100049

³清华大学电子工程系, 北京市, 100084

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn

拉伸性是电子皮肤设备的关键。然而, 当前的可拉伸薄膜晶体管并不具备足够低的工作电压和良好的稳定性, 这大大限制了其在生物医学应用中的使用。因此, 我们提出了范德华控制弹性体/碳量子点界面极化方法, 以形成具有620%拉伸应变和大面积膜均匀性(> A4纸尺寸)的混合聚合物电介质。使用混合聚合物电介质, 制备的固有可拉伸有机薄膜晶体管表现出低于5 V的低工作电压、100%应变容差和出色的工作稳定性, 以及 10^5 的高导通电流/关断电流比和 500mV dec^{-1} 的陡峭亚阈值斜率。基于这种器件技术, 实现了在报道的可拉伸晶体管的最高值中具有90 V/V的高增益的放大器。该放大器首次应用于检测人体电生理信号, 输出信号幅度超过0.2 V, 甚至超过了用于人体电生理监测的其他类型的先进有机放大器。这种可拉伸的设备技术充分满足了可穿戴生物医学应用的安全性和便携性要求, 为具有信号控制和放大能力的电子皮肤带来了新的机遇。

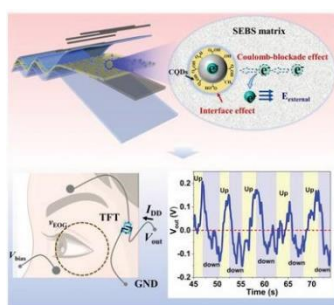


Fig. 1 Low-Voltage Intrinsically Stretchable Organic Transistor Amplifiers for Ultrasensitive Electrophysiological Signal Detection

关键词: 杂化介电聚合物, 本征可拉伸有机晶体管放大器, 低电压, 电生理信号探测器

参考文献

- [1] B. C. K. Tee, A. Chortos, A. Berndt, A. K. Nguyen, A. Tom, A. McGuire, Z. C. Lin, K. Tien, W. G. Bae, H. Wang, P. Mei, H. H. Chou, B. Cui, K. Deisseroth, T. N. Ng, Z. Bao, *Science*, 2015, 350, 313.
- [2] Chen Jiang, Hyung Woo Choi, Xiang Cheng, Hanbin Ma, David Hasko, Arokia Nathan, Printed subthreshold organic transistors operating at high gain and ultralow power, 363, 6428, 719-723, *Science*, 2019.

富勒烯的制备与应用

王春儒^{1*}, 吴波, 甄明明

¹ 中国科学院化学研究所, 100190

*Email: crwang@iccas.ac.cn

富勒烯因其稳定的结构和独特的电子特性而备受关注, 在能源、材料、生命医学等领域具有广泛的应用。我们近年来在富勒烯应用方面取得系列研究进展, 包括:

1、发展了四代富勒烯制备技术, 建成了国际上第一条金属富勒烯宏量生产装置, 第一套在 Ar 气氛条件下规模化生产高纯富勒烯的生产线, 满足了富勒烯应用的需求, 特别是在生物医药领域对于高纯度富勒烯材料的需求;

2、研究了富勒烯光电特性, 富勒烯不但能够作为优秀的电子受体材料广泛应用于有机光伏器件, 而且在太阳能分解水制氢等方面具有重要应用前景。我们通过改变富勒烯的种类、构型以及外接功能修饰基团等方式调控了其激发态特性, 开发出一类具有 μs 级长寿命三重态的富勒烯及衍生物材料, 实现了激发态电子转移方向的原位调控和富勒烯-donor 衍生物电荷分离态位置的理论预测; 我们还利用具有强烈分子内电子转移特性的富勒烯-卟啉衍生物构筑有序的层状结构组装体, 形成超快的电荷分离和高效的电荷传输, 提升了有机光催化材料的太阳能转化效率;

3、基于富勒烯和金属富勒烯优异的结构稳定性、超级抗氧化特性, 以及良好的生物相容性, 研究了他们在治疗恶性肿瘤、心肌梗死、糖尿病、肺纤维化等重大疾病方面的应用, 并从分子生物学水平上探索了它们对于多种重大疾病的治疗机理;

关键词: 富勒烯; 纳米材料; 光电特性; 自由基

参考文献

[1] Wang, C.; Wu, B.; Li, Y.; Dong, T.Y., Wang, CR. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2023, DOI 10.1002/anie.202300377.

[2] Wang, T.S.; Wang, CR., **2019, 15, 48**

二维共价有机框架薄膜的合成与光电功能

王栋¹

¹中国科学院化学研究所, 北京中关村北一街, 100190

*Email: wangd@iccas.ac.cn

构筑具有高度有序 π 共轭结构的二维单分子层或薄膜材料对于发展高性能的有机电子器件具有重要意义。基于 π 共轭分子以共价键连接形成的二维共价有机框架(2D COF), 具有独特的二维 π 共轭平面和三维方向上高度有序的 π 堆积结构, 可能具有独特的光电性质和功能。我们发展了基于液固界面反应的制备COF薄膜的一般方法。通过在六方相氮化硼和单层石墨烯表面直接生长COF薄膜, 分别构建了水平结构和垂直结构的两种场效应晶体管, 研究了其面内横向电荷传输性质及 π - π 堆积方向的电子学性能。我们构筑了基于COF的电致变色器件, COF高度有序的结构显著提升了其响应速度等性能。

关键词: 共价有机框架; 电致变色器件; 光电功能薄膜

参考文献

- [1] Q. Hao, Z.-J. Li, C. Lu, S. Bing, Y.-W. Zhong, L.-J. Wan, D. Wang. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 19831-19838.
- [2] Q. Hao, Z.-J. Li, B. Bai, X. Zhang, Y.-W. Zhong, L.-J. Wan, D. Wang. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 12498-12503.

基于翻转 C-H 活化策略高效构筑蓝光有机发光二极管主体材料

王菲, 张骆强, 宾正杨*, 游劲松*

四川大学化学学院绿色化学与技术教育部重点实验室, 成都望江路 29 号, 610064

*Email: binzhengyang@scu.edu.cn; jsyou@scu.edu.cn

高性能蓝光有机发光二极管 (OLED) 的开发仍然是一项具有挑战性的任务。近年来, 蓝光发光材料的研究受到广泛关注, 通过发展新型蓝光发光材料可以有效改善蓝光 OLED 的效率和稳定性。相比于发光材料, 主体材料对于蓝光 OLED 的性能也同样起着至关重要的作用。然而, 针对于蓝光主体材料的研究却相对落后。因此, 我们发展了铱催化的分子内 C-H/C-H 偶联反应, 为快速构筑吡啶稠杂的双极主体材料库提供强有力的工具。基于此反应, 我们设计并合成了一种基于苯并[4,5]噻吩并[2,3-*b*]吡啶骨架 (BTP) 的双极主体材料 (DCz-BTP)。吡啶单元的引入可以形成强的分子间相互作用, 从而实现优良的双极传输性质。将 DCz-BTP 作为主体材料, 蓝光热活化延迟荧光 OLED (TADF-OLED) 展现出 2.8 V 的低启亮电压和 29.0% 的高外量子效率 (EQE)。此外, 蓝光 TADF 敏化荧光 OLED (TSF-OLED) 也展现出 2.8 V 的低启亮电压, 其 EQE 高达 20.5%。

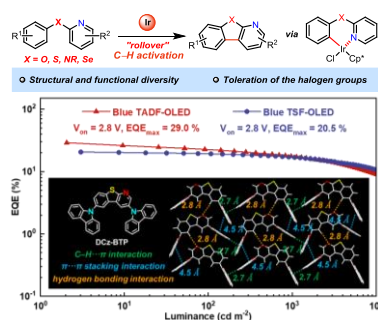


Fig. 1 “Rollover” C-H activation enables an easy toolbox to pyridine-fused bipolar hosts for blue organic light-emitting diodes (unpublished results)

关键词: 碳氢活化; 分子内 C-H/C-H 偶联; 吡啶稠杂; 双极主体材料; 蓝光有机发光二极管

参考文献

[1] F. Wang, L. Zhang, Z. Bin*, J. You*, *in preparations.*

智能化有机光电器件

王翰林

中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街2号，100190

*Email: wanghanlin@iccas.ac.cn

有机场效应晶体管 (OFETs) 作为有机电子学的基本元件，不仅是研究有机材料输运特征的载体，更是孕育新型可穿戴设备和物联网传感器的摇篮。但在 OFET 研究过程中，器件界面调控以及多功能光电体系的构筑，是其走向实用的瓶颈问题。近年来，我们围绕该领域的关键难题开展研究，在智能化有机光电器件领域取得以下进展：

1. 构筑了一种高动态范围的三组分集成型感光像素^[1]，突破了该类器件微弱信号探测的瓶颈。由有机感光分压器和 OFET 构成。光照下分压器改变 OFET 跨导，可放大微弱室内光信号并实现灰度响应。
2. 采用浮栅-双极性非易失性存储器和分压器的集成，实现了一种无需滤光片的有机近红外感光阵列^[2]，解决了有机近红外体系“可见波段灵敏度高于近红外”的共性问题。该器件依靠信号的非易失性程度识别入射光波段。
3. 构建了铁电-电化学异质介电层，实现了从毫秒到万秒时间跨度的柔性电路型光电突触器件^[3]，获得了在光谱选择和记忆成像方面极具应用潜力的视觉感知系统。

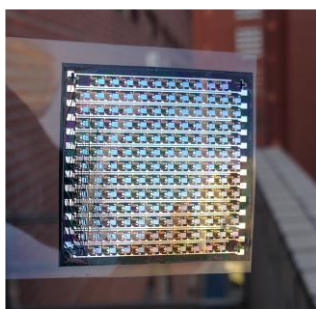


Fig. 1 Three-Component Integrated Ultrathin Organic Photosensors for Plastic Optoelectronics.

关键词： 有机光电体系；有机薄膜电路；有机信号处理器件

参考文献

- [1] H. Wang, H. Liu, Q. Zhao, C. Cheng, W. Hu* and Y. Liu*, 2016, Three-Component Integrated Ultrathin Organic Photosensors for Plastic Optoelectronics, *Adv. Mater.* **2016**, 28, 624.
- [2] H. Wang, H. Liu, Q. Zhao, Z. Ni, Y. Zou, J. Yang, L. Wang, Y. Sun, Y. Guo*, W. Hu*, Y. Liu*, A retina-like dual band organic photosensor array for filter-free near-infrared-to-memory operations, *Adv. Mater.* **2017**, 29, 1701772.
- [3] H. Wang, Q. Zhao, Z. Ni, Q. Li, H. Liu, Y. Yang, L. Wang, Y. Ran, Y. Guo*, W. Hu*, Y. Liu*, A ferroelectric/electrochemical modulated organic synapse for ultraflexible, artificial visual - perception system, *Adv. Mater.* **2018**, 30, 1803961.

立体异构调控的 AIEgens 组装和发光机理的理论研究

王慧¹, 杨俊芳¹, 郑小燕^{1,*}

¹北京理工大学化学与化工学院, 北京理工大学良乡校区南区, 100081

*Email: xiaoyanzheng@bit.edu.cn

由于自组装的层次性, 通过顺反立体异构调控构筑基元的空间构型是控制组装体结构和功能的有效策略^[1-2]。四苯乙烯 (TPE) 是一种典型的聚集诱导发光分子 (AIEgen), 实验中广泛报道了基于 TPE 内核的 Z-/E-异构体在组装和发光性质方面的显著差异。本报告通过分子动力学模拟、极化连续介质模型和杂化量子力学/分子力学模型相结合的多尺度模拟方法, 探究了 (Z)-/(E)-TPE-UPy 体系组装基元构象-分子堆积-发光性质间的关系^[3]。计算表明, (Z)-TPE-UPy 的浓度依赖性自组装源于热力学稳定性和氢键强度间的竞争。低浓度下, 热力学稳定性主导组装过程, 体系倾向于形成闭环式二聚体; 高浓度下, 链式结构具有更强的氢键强度, 分子倾向于形成锯齿状链式构象。(E)-TPE-UPy 遵循浓度无关的等键聚合机制, 通过四重氢键线性连接形成聚合物。光物理性质计算表明, 辐射跃迁速率增加和重整能减小协同导致了 (Z)-/(E)-TPE-UPy 聚集态荧光发射增强。本研究成功阐释了立体异构在组装形态和发光性质中的关键作用, 为基于立体异构体的新型超分子功能材料的设计提供了可靠的理论依据。

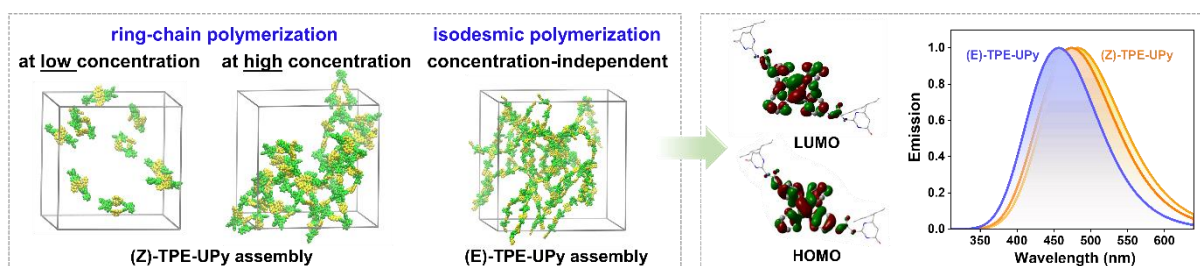


Fig. 1 Schematic plot of (Z)-/(E)-TPE-UPy assembly and fluorescent properties of nano-assemblies

关键词: 立体异构; 自组装机制; 聚集诱导发光; 多尺度理论模拟

参考文献

- [1] Peng, H. Q.; Zheng, X. Y.; Han, T.; Kwok, R. T. K.; Lam, J. W. Y.; Huang, X. H.; Tang, B. Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*: 10150.
- [2] Yang, J. F.; Peng, Q.; Xue, R. D.; Li, Z. S.; Zheng X. Y. *Mater. Chem. Front.*, **2021**, *5*: 1806.
- [3] Wang, H.; Yang, J. F.; Zheng X. Y. Elucidation of the key role of isomerization in the self-assembly and luminescence properties of AIEgens, *Phys. Chem. Chem. Phys.* in revision.

锡基钙钛矿发光

王建浦

南京工业大学，常州大学

信息显示丰富着现代人类生活的方方面面。随着信息社会的快速发展，未来显示技术对于高效率、高亮度、柔性可穿戴等方面提出了新的要求。传统无机发光二极管难以获得大面积柔性器件，而有机发光二极管因其激子特性难以在大电流下实现高亮度和高效率。金属卤化物钙钛矿材料兼具无机半导体高导电性和有机材料可溶液法制备的优点，且具有高荧光量子效率、高色纯度、带隙简单易调节等特点。近年来，钙钛矿发光二极管效率提升十分迅速，在下一代显示领域极具竞争力。但是，铅的毒性问题尚未得到妥善解决。本报告将从非铅钙钛矿发光二极管面临的挑战、铅基钙钛矿发光二极管的启示等角度展开，重点介绍锡基钙钛矿的维度调控和微纳结构调控等方面的相关研究进展。

锡基钙钛矿晶体生长机制研究

王军方¹, 黄俊杰¹, 王煦¹, 杨俊杰¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

在无铅光伏应用领域中, 锡基钙钛矿是有毒的铅基钙钛矿最有希望的替代者。然而, 锡基钙钛矿结晶动力学中潜在的晶体生长机制缺乏深入明确的探究。我们以无铅锡基钙钛矿为研究对象, 从结晶动力学和热力学角度出发, 揭示了锡基钙钛矿内在的晶体生长机制与其薄膜质量和光伏器件性能之间的关系。通过在FASnI₃钙钛矿前驱体溶液中引入2-苯氧基乙胺溴酸盐(POEBr)来调节FASnI₃钙钛矿晶体不同晶面的表面能, 制备了具有高度取向性的FASnI₃-POEBr钙钛矿薄膜。我们发现FASnI₃钙钛矿薄膜中晶体生长由“奥斯特瓦尔德熟化(OR)”晶体生长机制控制。然而, 在FASnI₃-POEBr钙钛矿薄膜中, 具有各向异性性质的锡基钙钛矿晶体可以通过“定向附着(OA)”的晶体生长机制生长, 其中两个具有同一结晶取向的小纳米晶体直接结合在一起产生一个较大的纳米晶体。OA晶体生长机制可以降低晶体生长速率, 从而可以形成致密、光滑和具有高度取向性的锡基钙钛矿薄膜, 使得太阳能电池器件光电转换效率超过14%。

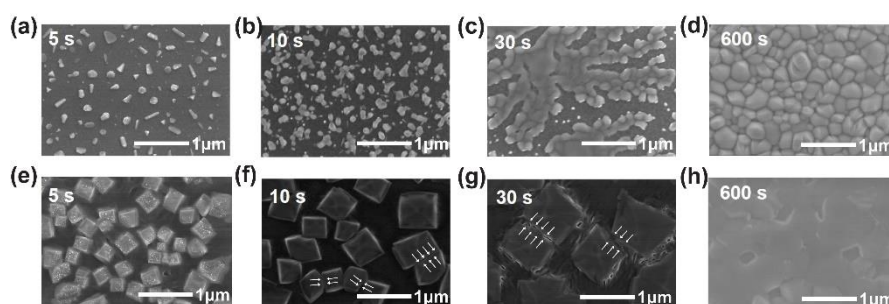


Fig. 1 Scanning electron microscopy images of FASnI₃ films annealed at 70 °C for (a) 5 s, (b) 10 s, (c) 30 s, and (d) 600 s. Scanning electron microscopy images of FASnI₃-POEBr films annealed at 70 °C for (e) 5 s, (f) 10 s, (g) 30 s, and (h) 600 s.

关键词: 锡基钙钛矿; 定向附着; 表面能; 晶体生长

参考文献

- [1] Wang, J.; Yang, C.; Chen, H.; Lv, M.; Liu, T.; Chen, H.; Xue, D-J.; Hu, J-S.; Han, L.*; Yang, S.*; Meng, X.* *ACS Energy Lett.* **2023**, *8*: 1590-1596.
- [2] Wang, J.; Gao, Z.; Yang, J.; Lv, M.; Chen, H.; Xue, D-J.; Meng, X.*; Yang, S.* *Adv. Energy Mater.* **2021**, *11*: 2102131.

空间电荷转移高分子荧光材料

王利祥

中国科学院长春应用化学研究所，长春，130022

E-mail: lixiang@ciac.ac.cn

电荷转移（CT）态是电子给体（D）与电子受体（A）之间发生电子转移所形成的激发态，是有机共轭体系的基本特性之一。通过调控给/受体之间的电荷转移态强度，不仅能够实现共轭高分子的红绿蓝三基色发光，还能够促进其反向系间窜越过程，实现对三线态激子的有效利用。目前，无论是经典的高分子荧光材料，还是具有热活化延迟荧光效应的高分子发光材料，通常采用给-受体（D-A）共轭连接的设计思路，其发光本质来源于给体到受体的化学键电荷转移（through-bond charge transfer）。

我们将空间电荷转移引入到高分子体系，提出了“空间电荷转移高分子荧光材料”的学术概念，通过采用非共轭高分子骨架（聚苯乙烯骨架）实现电子给体与电子受体的空间 π -堆积，发展了同时具有空间电荷转移（through-space charge transfer, TSCT）效应和热活化延迟荧光（TADF）效应的高分子荧光材料，不仅突破了蓝光高分子荧光材料器件效率偏低的瓶颈限制，而且实现了全光谱发射以及白光发射，成为构建热活化延迟荧光高分子的新范式。同时，采用聚降冰片烯为非共轭高分子骨架，发展了给体和受体空间排列方式固定且可控（“面对面”或“边对面”排列）的聚降冰片烯类空间电荷转移高分子荧光材料，获得了蓝光高分子荧光材料的最高外量子效率（18.8%）；采用六苯基苯作为分子骨架，发展了具有多重给/受体相互作用的空间电荷转移树枝状荧光材料，开拓出同时具有空间电荷转移效应、热活化延迟荧光效应和聚集诱导发光效应的荧光材料新体系。

References

- [1] Jun Hu, Yufei Chang, Fan Chen, Qingqing Yang, Shiyang Shao, and Lixiang Wang, *J. Polym. Sci.* 2022, 60, 1855
- [2] Xingdong Wang, Jun Hu, Jianhong Lv, Qingqing Yang, Hongkun Tian, Shiyang Shao, Lixiang Wang, Xiabin Jing, and Fosong Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 16585
- [3] Jun Hu, Yinuo Wang, Qiang Li, Shiyang Shao, Lixiang Wang, Xiabin Jing, and Fosong Wang, *Chem. Sci.* 2021, 12, 13083
- [4] Qiang Li, Jun Hu, Jianhong Lv, Xingdong Wang, Shiyang Shao, Lixiang Wang, Xiabin Jing, Fosong Wang, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 20174.
- [5] Shiyang Shao, Lixiang Wang, *Aggregate* 2020, 1, 45.

复杂分子系统的大尺度动力学模拟

王林军*

浙江大学化学系, 浙江省杭州市西湖区余杭塘路 866 号, 310058

*Email: ljwang@zju.edu.cn

有机光电子学中的很多关键过程涉及复杂分子系统, 属于非绝热动力学的范畴。全量子动力学只能处理较小的体系, 而微扰理论常用于处理特定问题, 混合量子-经典动力学原则上更为适用, 但仍需解决两个关键问题, 其一是非绝热耦合在能量简并点发散, 导致数值不稳定, 其二是需要考虑内在的量子退相干, 以正确刻画长时动力学。近年来, 我们开发了一系列新方法, 从根本上解决了这些问题, 并开发了普适模拟软件SPADE, 可以非微扰地同时处理不同电子耦合强度的体系, 使复杂分子系统的大尺度动力学模拟成为可能[1-5]。我们研究了不同分子晶体中的电荷传输, 发现电子耦合符号对动力学有显著影响, 与态密度的对称性密切相关[6]。我们研究了量子点/聚合物界面, 发现存在跨越0.5eV大势垒的由熵和极化子效应主导的反常电荷转移, 揭示了电子泄露是绿光和蓝光量子点发光二极管的关键效率损失通道, 并通过材料设计使效率达到理论极限[7]。我发展了非绝热统计力学方法, 也给出了一致的结果[8]。

关键词: 非绝热动力学; 电荷传输机制; 电子耦合符号效应; 反常界面电荷转移

参考文献

- [1] Qiu, J.; Bai, X.; Wang, L. *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*: 4319.
- [2] Qiu, J.; Bai, X.; Wang, L. *J. Phys. Chem. Lett.* **2019**, *10*: 637.
- [3] Wang, L.; Qiu, J.; Bai, X.; Xu, J. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2020**, *10*: e1435.
- [4] Qiu, J.; Lu, Y.; Wang, L. *J. Chem. Theory Comput.* **2022**, *18*: 2803.
- [5] Wang, Z.; Dong, J.; Qiu, J.; Wang, L. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, *14*: 22929.
- [6] Wang, Z.; Dong, J.; Wang, L. *submitted to J. Phys.: Condens. Matter* **2023**.
- [7] Deng, Y.; Peng, F.; Lu, Y.; Zhu, X.; Jin, W.; Qiu, J.; Dong, J.; Hao, Y.; Di, D.; Gao, Y.; Sun, T.; Zhang, M.; Liu, F.; Wang, L.; Ying, L.; Huang, F.; Jin, Y. *Nat. Photonics* **2022**, *16*: 505.
- [8] Lu, Y.; Dong, J.; Wang, L. *submitted to J. Phys. Chem.* **2023**.

导电高分子生物传感与生物医药研究

王树*

中国科学院化学研究所，北京市海淀区中关村北一街2号，100190

*Email: wangshu@iccas.ac.cn

目前集识别、成像与治疗功能于一体的多功能生物医药体系有望成为重大疾病诊断与治疗的新策略。我们课题组的主要研究内容是设计合成新型有机共轭分子材料，并探索其在生物识别、细胞成像以及疾病治疗领域的新应用。我们设计合成了系列共轭聚合物荧光探针，研究了它们的生物相容性，构建了基于共轭聚合物的超分子药物体系并研究了它们的生物功能。设计、合成了一种新的共价连接 π 共轭寡聚分子与巯基的紫杉醇体系 (OPV-S-PTX)。实验结果表明OPV-S-PTX的IC₅₀ 相比PTX本身降低124倍，对其增强抗肿瘤作用的分子机制进行了探讨，发现OPV-S-PTX可极大促进微管束在肿瘤细胞的形成，导致细胞凋亡。通过选择性的原位自组装技术可提高紫杉醇疗效，降低毒性与耐药性。另外我们提出并构建了可逆抗生素超分子组装体系，通过组装与解组装过程，抗菌治疗时“开启”抗生素活性，治疗后“关闭”其抗菌活性。抗菌实验表明，该策略能有效地延缓耐药性病原菌的生成。这些结果为设计基于共轭聚合物的识别、成像与疾病治疗多功能体系提供了新思路。

关键词：共轭高分子；光学探针；生物传感；生物医药

参考文献

- [1] Q. Shen, H. Zhang, Y. Huang, M. Li, H. Zhao, Z. Yang, H. Zhao, Q. Liu, Z. Fu, Y. Di, L. Liu, H. Bai, F. Lv, Y. Chen, Y. Liu, S. Wang, *Sci. Transl. Med.* **2023**, **15**: eabq5753.
- [2] Shen, Q.; Huang, Y.; Bai, H.; Lv, F.; Wang, S. *Acc. Mater. Res.* **2023**, **4**: 57.
- [3] Zhou, X.; Zeng, Y.; Lv, F.; Bai, H.; Wang, S. *Acc. Chem. Res.* **2022**, **55**: 156.
- [4] Zhou, L.; Lv, F.; Liu, L.; Wang, S. *Acc. Chem. Res.* **2019**, **52**: 3211.
- [5] Zhu, C. L.; Liu, L. L.; Yang, Q.; Lv, F. T.; Wang, S. *Chem. Rev.* **2012**, **112**: 4687.
- [6] Duan, X.; Liu, L.; Feng, F.; Wang, S. *Acc. Chem. Res.* **2010**, **43**: 260.

金属富勒烯的电子自旋与分子磁性

王太山^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: wangtais@iccas.ac.cn

内嵌金属富勒烯是将金属填充到富勒烯碳笼内形成的嵌套结构分子。金属元素在富勒烯笼内的形式包括单金属离子、双金属离子、三金属离子、三金属氮化物团簇、金属碳化物团簇、金属氧化物团簇、金属硫化物团簇、金属碳氮化物团簇等。金属富勒烯的电子结构丰富而多变, 其中分子轨道上含有未成对电子的金属富勒烯具有优异的电子自旋特性, 而内嵌镧系元素的金属富勒烯还表现出独特的单分子磁体特性, 它们在分子器件、磁性材料、分子探针、量子信息等方面具有应用潜力。

近年来我们以金属富勒烯的分子电子学和分子磁性为研究重点, 研究了金属富勒烯电子自旋的极化和调控, 发现了电子自旋对限域空间、局域弱磁场、分子运动等笼外环境的灵敏响应性, 设计了发光的金属富勒烯单分子磁体, 推动了金属富勒烯的功能化研究。

关键词: 金属富勒烯; 电子自旋; 分子磁性; 超分子;

参考文献

- [1] Yongqiang Feng, Taishan Wang*, Yongjian Li, Jie Li, Jingyi Wu, Bo Wu, Li Jiang, Chunru Wang*, Steering Metallofullerene Electron Spin in Porous Metal-Organic Framework, *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 15055-15060.
- [2] Chong Zhao, Haibing Meng, Mingzhe Nie, Qiang Huang, Pingwu Du,* Chunru Wang* and Taishan Wang*, Construction of a short metallofullerene-peapod with a spin probe, *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 11511-11514.
- [3] Mingzhe Nie, Jiayi Liang, Chong Zhao, Yuxi Lu, Jie Zhang, Wang Li, Chunru Wang, and Taishan Wang*, Single-Molecule Magnet with Thermally Activated Delayed Fluorescence Based on a Metallofullerene Integrated by Dysprosium and Yttrium Ions, *ACS Nano*, **2021**, *15*, 19080-19088.
- [4] Haibing Meng, Yongqiang Chai, Chong Zhao, Mingzhe Nie, Chunru Wang and Taishan Wang*, Covalently bonded two spin centers of paramagnetic metallofullerene dimer, *Nano Res.*, **2021**, *14*, 4658-4663.

有机太阳能电池分子聚集体调控及器件研究

王涛^{1,*}

¹武汉理工大学材料学院, 湖北武汉, 430070

*Email: twang@whut.edu.cn

有机太阳能电池质轻、柔性、可穿戴、单结电池效率突破19%，叠层电池效率突破20%，并显示出巨大的发展潜力。有机半导体分子的共轭结构和杂元素使分子间存在较强的非共价相互作用，易于自组装形成分子聚集体，故其光电性能不仅依赖于分子本征的光电性能，更取决于大量分子聚集后所展现的新性能，直接决定光电转换过程和光伏器件的效率和寿命。该研究通过热场诱导聚集和溶液诱导聚集等方式，实现了分子和微纳尺度下多种非富勒烯受体分子多级聚集体的有效调控和高效率器件制备，通过H/J聚集体共存拓宽了器件的吸光范围，通过给/受体分子取向的一致性调控提高了激子解离效率，通过抑制非富勒烯分子大尺寸球晶/纤维晶的生长使给/受体形成细致而连续的相区，提高了电荷传输速率，最后大幅度提升了有机光伏器件的光电转换效率，制备出效率超过18%的单结二元光伏器件。

关键词：有机太阳能电池；非富勒烯受体；分子聚集体；光电性能；器件效率

参考文献

- [1] Li, W.; Chen, M.; Cai, J.; et al., *Joule*, **2019**, **3**: 819.
- [2] Guo, C.; Li, D.; Wang, L.; et al., *Adv. Energy Mater.*, **2021**, **11**: 2102000.
- [3] Du, B.; Ma, Y.; Guo, C.; et al., *Adv. Funct. Mater.*, **2021**, **31**: 2105794.
- [4] Li, W.; Chen, M.; Zhang, Z.; et al., *Adv. Funct. Mater.*, **2019**, **29**: 1807662.
- [5] Li, D.; Guo, C.; Zhang, X.; et al., *Sci. China Chem.*, **2022**, **65**, 373.

稠杂芳烃分子材料与光电性质

王小野^{1,*}

¹南开大学化学学院, 元素有机化学国家重点实验室, 天津, 300071

*Email: xiaoye.wang@nankai.edu.cn

有机共轭功能分子是有机光电材料与器件这一前沿交叉领域的核心基础与创新源头。稠环芳烃在有机光电材料的发展中扮演了重要角色, 涌现出了诸多明星分子, 如蒽、红荧烯、并五苯、六苯并蒽、茈萘亚胺等, 为实现高性能光电器件奠定了材料基础。新型稠环芳烃骨架的创制对解决现存挑战、催生新兴应用、推动有机光电领域的进一步发展具有重要的意义。有机光电材料的性质本质上由分子的 π 电子结构决定, 因此, 如何调控稠环芳烃的电子结构是发展新型稠环芳烃骨架及相关材料的关键科学问题。

近期, 我们围绕稠环芳烃电子结构调控的问题, 以光电功能为导向, 通过主族元素掺杂的策略, 发展了一系列稠杂芳烃分子材料, 基于1,4-双硼杂苯、1,4-硼氮杂苯和1,2-硼氮杂苯三种结构基元, 构筑了一系列原创的新型稠杂环分子骨架, 揭示了杂原子的独特效应, 实现了高效率的反Kasha发光材料及高不对称因子的手性光学材料, 获得了高迁移率场效应晶体管器件, 为新型稠杂环材料的发展提供了新思路。

关键词: 有机共轭分子; 稠环芳烃; 有机光电材料; 有机半导体

参考文献

- [1] Liu, P.; Chen, X.-Y.; Cao, J.; Ruppenthal, L.; Gottfried, J. M.; Müllen, K.; Wang, X.-Y.* *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 5314-5318.
- [2] Wang, X.-Y.*; Yao, X.; Müllen, K.* *Sci. China Chem.* **2019**, *62*, 1099-1144.
- [3] Chen, C.; Du, C.-Z.; Wang, X.-Y.* *Adv. Sci.* **2022**, DOI: 10.1002/advs.202200707.
- [4] Li, J.-K.; Chen, X.-Y.; Guo, Y.-L.; Wang, X.-C.; Sue, A. C.-H.; Cao, X.-Y.; Wang, X.-Y.* *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 17958-17963.
- [5] Chen, C.; Wang, M.-W.; Zhao, X.-Y.; Yang, S.; Chen, X.-Y.; Wang, X.-Y.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, DOI: 10.1002/anie.202200779.

无铅卤化物双钙钛矿光电器件的研究

王煦¹, 王军方¹, 支鸿富¹, 孙昌族¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京市怀柔区, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

无铅卤化物双钙钛矿作为解决铅基卤化物钙钛矿毒性问题的有吸引力的替代品正在成为目前钙钛矿光电器件的研究热点。同时无铅卤化物双钙钛矿光电器件由于其优异的稳定性、多种多样的化学组合以及优越的光电特性, 多种新颖的光电器件已经被开发。目前铋基太阳能电池被研究的较为广泛, 但目前为止其光电转化效率最高只有6.37%, 仍然远低于占主导地位的铅基电池。在近期的工作中我们以 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 为基础, 使用工艺较为简单的空穴传输层, 在前驱体溶液中加入铵盐(例如APDI等)来取代 Cs^+ 阳离子辅助调控结晶形成双钙钛矿活性层, 降低缺陷态密度, 提高铋基钙钛矿太阳能电池的光电转换效率和稳定性, 制备了全新结构的 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 基太阳能电池, 并得到较高的光电转换效率。同时, 由于 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 较宽的带隙, 我们还将其用于室内光伏器件的制备, 目前我们已经在室内光条件下得到较高的开路电压等优越性能。以上研究有助于深入研究无铅钙钛矿光电器件的优化提升, 为无铅钙钛矿光电器件的多元化研究发展提供了新思路。

关键词: 无铅卤化物双钙钛矿; 铋基太阳能电池; 室内光伏。

参考文献

- [1] Zhang, Z.; Sun, Q.; Lu, Y.; Lu, F.; Mu, X.; Wei, S.-H.; Sui, M. *Nat. Commun.* **2022**, **13**: 3397.
- [2] Wei, F.; Deng, Z.; Sun, S.; Zhang, F.; Evans, D. M.; Kieslich, G.; Tominaka, S.; Carpenter, M. A.; Zhang, J.; Bristowe, P. D.; Cheetham, A. K. *Chem. Mater.* **2017**, **29**: 1089.

近红外有机晶体发光和激光

王雪东^{1,*}

¹ 苏州大学功能纳米与软物质研究院, 苏州市工业园区仁爱路 199 号, 215500

*Email: wangxuedong@suda.edu.cn

近红外固态激光器推动了电信通讯, 光谱学和医学诊断等领域的发展。然而, 由于窄带隙有机分子较低的受激发射以及缺乏利于粒子数反转的有效四能级体系, 有机近红外固态激光器的发展仍面临严峻挑战。在本工作中, 我们基于激发态分子内质子转移 (ESIPT) 活性有机小分子制备了有机单晶纳米线。2.5 ps 的动态分子内质子转移过程证明了四能级体系的建立。因此, 在长度为 40 μm 的纳米线实现了具有 5.3 $\mu\text{J cm}^{-2}$ 的低阈值的室温 775 nm 近红外固体激光。我们的工作清楚地展示了 ESIPT 激光器的机理, 并且首次实现了 760 nm 以上的有机微纳激光, 这将促进近红外波长下有机微纳米尺度相干光源的发展。

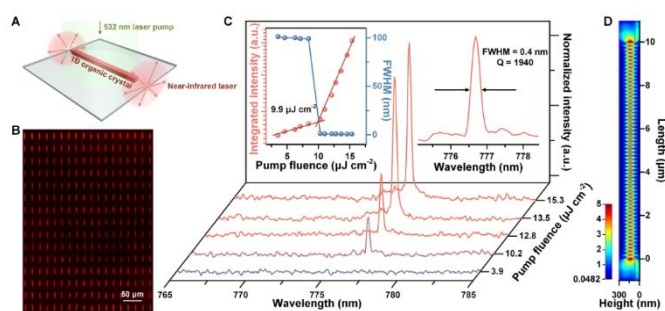


Fig. 1 Near-infrared organic solid-state lasers.

关键词: 激发态质子转移; 四能级体系; 微纳晶体; 近红外激光; 有机半导体

参考文献

- [1] Chang-Cun Yan, Yan-Ping Liu, Wan-Ying Yang, Jun-Jie Wu, Xue-Dong Wang* and Liang-Sheng Liao*, Excited-State Intramolecular Proton Transfer Parent Core Engineering for Six-Level System Lasing Toward 900 nm, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202210422.
- [2] Ming-Peng Zhuo, Yi Yuan, Yang Su, Song Chen, Ye-Tao Chen, Zi-Qi Feng, Yang-Kun Qu, Ming-De Li, Yang Li, Bing-Wen Hu, Xue-Dong Wang*, and Liang-Sheng Liao*, Segregated array tailoring charge-transfer (CT) degree of organic cocrystal for the efficient near-infrared emission beyond 760 nm, *Adv. Mater.* **2022**, *34*: 2107169.
- [3] Jun-Jie Wu, Ming-Peng Zhuo, Runchen Lai, Sheng-Nan Zou, Chang-Cun Yan, Yi Yuan, Sheng-Yi Yang, Guo-Qing Wei, Xue-Dong Wang*, and Liang-Sheng Liao*, Cascaded excited-state intramolecular proton transfer towards near-infrared organic lasers beyond 850 nm, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*: 9114.

高迁移率 n 型聚合物半导体

王洋^{1,*}, 刘云圻¹¹复旦大学材料科学系, 上海市杨浦区淞沪路 2005 号, 200438

*Email: yangwang@fudan.edu.cn

在过去的三十年里, 聚合物半导体材料由于在机发光二极管 (OLED)、有机光伏 (OPV) 和有机薄膜晶体管 (OTFT) 等光电器件方面的巨大应用价值, 吸引了工业界和学术界的极大兴趣。n型聚合物半导体是有机电子器件的基本组成部分, 主要起到传输电子的功能。为了实现互补金属氧化半导体 (CMOS) 类逻辑电路和其他类型的p-n结器件, 高性能的p型和n型半导体都是必不可少的。然而, 目前n型聚合物半导体的器件性能指标, 包括迁移率, 空气稳定性等远远落后于p型材料。因此, 设计合成出电子迁移率 (μ_e) 超过 $5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的单极性 n 型聚合物半导体材料仍然是有机半导体中的一个巨大挑战^[1]。在第一个工作中, 我们使用C-H直接芳基化聚合反应(Direct Arylation Polymerization, DArP)来高效合成聚合物半导体材料。我们发现DPP噻吩二聚体具有非常高的C-H反应活性, 仅仅经过1个小时DArP, 就可以得到 M_n 接近30kDa的高分子量聚合物。最终, 所得聚合物在OTFT器件中均表现出高的空穴/电子迁移率, 其中聚合物PDFD-BT可达到 $3.75 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的高电子迁移率(Fig.1)^[2]。然而, DPP差强人意的拉电子能力导致所得聚合物的前线分子轨道 (FMO)能级较浅, 所得聚合物均表现出一定的空穴传输性能而很难表现出单极性n型OTFT性能。因此, 在第一个工作的基础上, 我们进一步提出了一种混合受体调制策略。即在DPP噻吩二聚体中进一步引入氟化苯并噻二唑用于构建具有深FMO能级的DPP基氟化三受体结构 (DFB)。基于DFB的聚合物均表现出更深的HOMO/LUMO能级和由非共价价象锁引起的形状稳定的骨架。其中, 基于聚合物pDFB-TF的OTFT展示了电子迁移率高达 $5.04 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的单极性n型性能(Fig.1)^[3]。综上, 我们高效合成了一系列高迁移率n型聚合物半导体材料并阐明了分子结构与载流子传输性能之间的构效关系, 为有机聚合物半导体的进一步实际应用奠定基础。

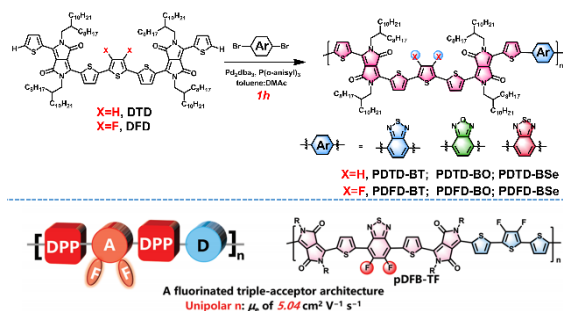


Fig. 1 High-mobility n-type semiconducting polymers

关键词: 有机半导体; n型聚合物; 直接芳基化聚合; 电子迁移率

参考文献

- [1] Tang, H.; Liang, Y.; Liu, C.; Hu, Z.; Deng, Y.; Guo, H.; Yu, Z.; Song, A.; Zhao, H.; Zhao, D.; Zhang, Y.; Guo, X.; Pei, J.; Ma, Y.; Cao, Y.; Huang, F. *Nature* **2022**, *611*: 271.
- [2] Shen, T.; Li, W.; Zhao, Y.; Liu, Y.; Wang, Y. *Matter* **2022**, *5*: 1953.
- [3] Shen, T.; Li, W.; Zhao, Y.; Wang, Y.; Liu, Y. *Adv. Mater.* **2023**, *35*: 1953.

有机超分子本征可拉伸光电材料与器件

王以轩^{1,*}, 胡文平¹

¹天津大学理学院, 天津市南开区卫津路 92 号, 300072

*Email: yx_wang@tju.edu.cn

本征可拉伸光电材料与器件是人机交互系统无缝集成的关键。然而, 以共轭结构为基础的有机材料其本征拉伸性与载流子传输效率在结构设计层面难以兼顾。针对该问题, 我们以超分子组装为手段、以纳米尺度聚集态调制为途径, 提出拓扑交联网络柔化导电高分子新策略、揭示组装介导共轭结构激发态新路径, 突破了可拉伸导体/发光半导体材料性能瓶颈, 并构建了可拉伸高密度电极阵列与高亮度发光二极管, 实现了高时空精度肌电信号记录、首例第四脑室神经核定位与脉搏信号随身实时显示。这一系列工作, 不仅为基于有机/高分子的生物界面人机交互核心材料设计提供了借鉴, 而且为柔性脑机接口、脑部临床诊断治疗、脑认知机理探究等生物技术发展提供了有力工具, 同时为新型柔性透明显示等信息产业奠定了基础。

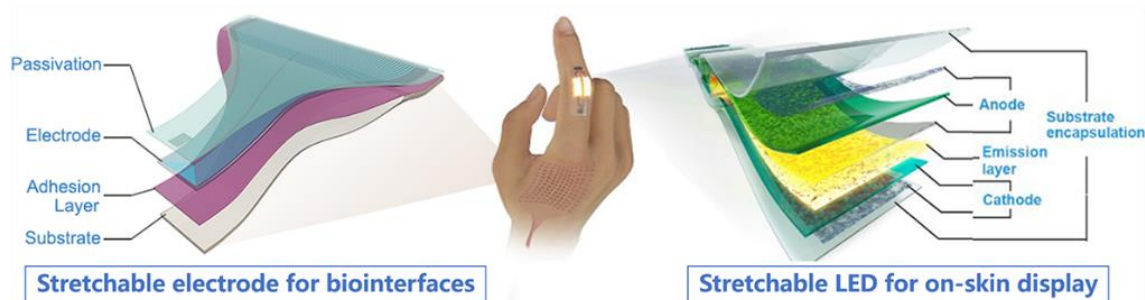


Fig. 1 Stretchable optoelectronics for conformal human-machine interfaces by supramolecular chemistry.

关键词: 有机光电材料; 超分子组装; 本征可拉伸材料与器件; 导电高分子; 电致发光聚合物

参考文献

- [1] Jiang, Y.; Zhang, Z.; Wang, Y.-X.; Li, D.; Coen, C.-T.; Hwaun, E.; Chen, G.; Wu, H.-C.; Zhong, D.; Niu, S.; Wang, W.; Saberi, A.; Lai, J.-C.; Wu, Y.; Wang, Y.; Trotsyuk, A. A.; Loh, K. Y.; Shih, C.-C.; Xu, W.; Liang, K.; Zhang, K.; Bai, Y.; Gurusankar, G.; Hu, W.; Jia, W.; Cheng, Z.; Dauskardt, R. H.; Gurtner, G. C.; Tok, J. B.-H.; Deisseroth, K.; Soltesz, I.; Bao, Z. *Science* **2022**, **375**: 1411.
- [2] Zhang, Z.; Wang, W.; Jiang, Y.; Wang, Y.-X.; Wu, Y.; Lai, J.-C.; Niu, S.; Xu, C.; Shih, C.-C.; Wang, C.; Yan, H.; Galuska, L.; Prine, N.; Wu, H.-C.; Zhong, D.; Chen, G.; Matsuhisa, N.; Zheng, Y.; Yu, Z.; Wang, Y.; Dauskardt, R.; Gu, X.; Tok, J. B.-H.; Bao, Z. *Nature* **2022**, **603**: 624.

高性能钙钛矿半导体室内光伏器件

王照奎*

苏州大学功能纳米与软物质研究院，苏州，215123

*Email: zkwang@suda.edu.cn

基于金属卤化物半导体材料的钙钛矿太阳能电池，近年来异军突起，在新能源领域展现出了非常光明的产业化前景。尽管已有长足的发展，钙钛矿薄膜的晶化动力学过程以及产生的缺陷态仍然是影响钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性进一步提高的主要因素。钙钛矿光伏器件的核心是钙钛矿吸光层在光场作用下的能量转换过程，以及以界面为载体的电荷转移和输运过程，钙钛矿薄膜的晶化、缺陷态钝化以及相关调控是该领域最重要的关键问题。另外，近年来，人们逐渐认识到利用低照度光伏技术为电子产品及电网供电的巨大市场潜力。钙钛矿材料带隙可调，通过改变钙钛矿组分，可以保证器件的最大感光度与特定场合使用的人造光源的光谱相吻合，可以更好地利用在室内电子产品的供电领域。本报告主要介绍报告人近年来在钙钛矿晶化动力学过程、缺陷态钝化、以及高性能钙钛矿室内光伏器件制备方面的研究成果。

关键词：金属卤化物钙钛矿；室内光伏；缺陷

参考文献

- [1] Chun-Hao Chen, Zhen-Huang Su, Yan-Hui Lou, Yan-Jun Yu, Kai-Li Wang, Gen-Lin Liu, Yi-Ran Shi, Jing Chen, Jun-Jie Cao, Liang Zhang, Xing-Yu Gao, and **Zhao-Kui Wang***, “Full-Dimensional Grain Boundary Stress Release for Flexible Perovskite Indoor Photovoltaics”, *Adv. Mater.* 34, 2000320 (2022)
- [2] Kai-Li Wang, Ying-Guo Yang, Yan-Hui Lou, Meng Li, Femi Igbari, Jun-Jie Cao, Jing Chen, Wen-Fan Yang, Chong Dong, Lina Li, Ren-Zhong Tai, **Zhao-Kui Wang***, “Smelt recrystallization of CsPbBr₂ perovskites for indoor and outdoor photovoltaics”, *eScience*, 1, 53 (2021)
- [3] Kai-Li Wang, Xiao-Mei Li, Yan-Hui Lou, Meng Li, **Zhao-Kui Wang***, “CsPbBr₂ perovskites with low energy loss for high-performance indoor and outdoor photovoltaics”, *Sci. Bulletin* 66, 347, (2021).
- [4] Meng Li[#], Wei-Wei Zuo[#], Antonio Gaetano Ricciardulli, Ying-Guo Yang, Yan-Hua Liu*, Kai-Li Wang, Gui-Xiang Li, Michael Saliba*, Diego Di Girolamo, Antonio Abate*, and **Zhao-Kui Wang***, “Embedded nickel-mesh transparent electrodes for highly efficient and mechanically stable flexible perovskite photovoltaics: toward a portable mobile energy source”, *Adv. Mater.* 32, 2003422 (2020)
- [5] Cong-Cong Zhang, Shuai Yuan, Yan-Hui Lou, Qing-Wei Liu, Meng Li, Hiroyuki Okada, and **Zhao-Kui Wang***, “Perovskite Films with Reduced Interfacial Strains via Molecular-Level Flexible Interlayer for Photovoltaic Application”, *Adv. Mater.* 32, 2001479 (2020)
- [6] Rui Wang, Jingjing Xue*, Kai-Li Wang, Zhao-Kui Wang*, Yanqi Luo, David Fenning, Guangwei Xu, Selbi Nuryyeva, Tianyi Huang, Yepin Zhao, Jiahui Zhu, Minhuan Wang, Shaun Tan, Ilhan Yavuz*, Kendall N. Houk* and Yang Yang*, “Constructive molecular configurations for surface-defect passivation of perovskite photovoltaics”, *Science*, 366, 1509-1513 (2019)

二维场效应晶体管传感器及生化检测

魏大程^{1,*}

¹复旦大学高分子科学系, 上海市淞沪路 2005 号, 200438

*Email: weidc@fudan.edu.cn

基于二维敏感材料的场效应晶体管传感器是先进传感研究的前沿领域之一。这类材料的大比表面积和趋于物理极限的厚度有利于提高传感性能, 同时各种电子过程完全发生在材料表界面, 极易受到各种界面的影响。因此, 器件界面调控是一个非常重要的科学问题。围绕二维场效应晶体管传感器的界面调控, 我们开发了可制备高质量二维敏感材料的新方法, 得到了具有高界面质量的晶体管传感器; 发展了分子机电系统、分子晶体二维尺度下光电增强效应、可控电荷界面掺杂等新原理调控了传感功能界面的电子过程, 实现了光电、化学传感性能的提升; 开发了新型传感器实现了病原体核酸、抗原、抗体的超灵敏检测。

关键词: 二维敏感材料; 场效应晶体管; 化学传感器

参考文献

- [1] Liu, D.; Wei D.*, et al. *Nat. Commun.* **2019**, **10**: 1188.
- [2] Cao, M.; Wei, D.*, et al. *Nat. Commun.* **2019**, **10**: 756.
- [3] Wang, Z., Wei, D.*, et al. *Nat. Commun.* **2019**, **10**: 1544.
- [4] Wang, L.; Wang, X.; Wei, D.* et al. *Nat. Biomed. Eng.* **2022**, **6**, 276.

基于二维层状半导体的偏振光探测器

魏钟鸣

中国科学院半导体研究所，北京市海淀区清华东路甲 35 号，100083

*Email: zmwei@semi.ac.cn

近年来，二维材料由于其独特的光电性能而受到了广泛的关注。相比于零带隙的石墨烯，二维半导体材料如MoS₂，WSe₂等具有一定宽度的带隙，使其可以广泛应用于各种光电器件（包括存储器、探测器和晶体管等）。我们课题组针对二维半导体材料及光电器件进行了长期的探索，围绕材料的设计、制备和器件应用取得了一些进展，部分材料在场效应晶体管和光探测器等方面显示出较好的性能。作为一种特殊的光电器件，偏振光探测器在光通信、成像等领域有非常重要的应用，这里我们主要针对新型二维半导体在偏振光探测方面的原型器件和工作机理进行汇报[1-5]。我们发现具有二维层状堆积晶体结构和面内各向异性的GeSe与GeAs等材料表现出优异的偏振光探测性能，并且探测波段从可见区覆盖到红外区，这两种材料都在808 nm的短波近红外区获得最优性能，并进一步进行了偏振图像传感器的探索。

关键词： 二维半导体；光探测器；偏振

参考文献

- [1] Z. Wei*, W. Hu*, J. Wang*, and et al. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 4030.
- [2] Z. Wei*, Z. Lou*, G. Shen* and et al. *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 6476.
- [3] Z. Wei*, and et al. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, *31* (6), 2006601.
- [4] Z. Wei*, and et al. *Adv. Mater.* **2021**, *33* (8), 2006908.
- [5] Z. Wei*, J. Li*, W. Hu*, and et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139* (42), 14976-14982.

通过调节硫族元素获得有效近红外二区 I 型光敏剂

用于光热/光动力治疗

温凯凯^{1,2}, 谭回^{1,*}, 彭谦^{3,*}, 陈皓², 马寒⁴, 王璐⁵, 彭爱东², 史钦钦

², 蔡晓东^{1,*}, 黄辉^{2,*}

¹工作单位, 地址, 邮编¹深圳市第二人民医院, 神经外科, 深圳, 518035

²中国科学院大学, 材料科学与光电技术学院, 北京, 101408

³中国科学院大学, 化学科学学院, 北京, 101408

⁴中山大学第五附属医院, 皮肤科, 珠海, 519000

⁵清华大学, 化学系, 北京, 100084

*Email: huitan@email.szu.edu.cn; qpeng@iccas.ac.cn; 13632660199@139.com; huihuang@ucas.ac.cn

在临床治疗中, 一些浸润深、体积大、部位复杂、手术/放疗可能性低的恶性肿瘤难以治愈。光动力/光热疗法(PDT/PTT)因其无创性、显著的肿瘤穿透深度和可忽略的副作用而被用于治疗此类肿瘤。一方面, 近红外二区(NIR-II)激光具有深度穿透(1064 nm 激光大于 1 厘米)和高最大允许曝光(1064 nm 激光是 1.0 W cm^{-2}) 优势。另一方面, 肿瘤的缺氧微环境要求光敏剂应为 PDT 的 I 型材料。

以噻吩异靛蓝衍生物为电子受体单元, 分别以噻吩、硒吩和碲吩作为电子给体单元开发出三种窄带隙半导体聚合物(PTS, PTSe 和 PTTe)(Fig.1)^[1]。给体-受体策略实现的强大 ICT 功能, 不仅将光吸收范围扩展到 NIR-II 区域, 而且通过重原子(硒和碲)的引入, k_{ISC} 显著增强, 促进了三重态激子的产生。PTS、PTSe 或 PTTe 与 $^3\text{O}_2$ 之间的吉布斯自由能变化小于零, 这有利于通过分子间电子转移(IET)实现 I 型 PDT。基于碲吩的 PTTe 纳米颗粒在体外常氧和缺氧条件下都表现出优异的生物相容性和前所未有的 NIR-II (1064 nm) I 型 PDT/PTT 性能, 可有效抑制体内 4T1 肿瘤增殖。

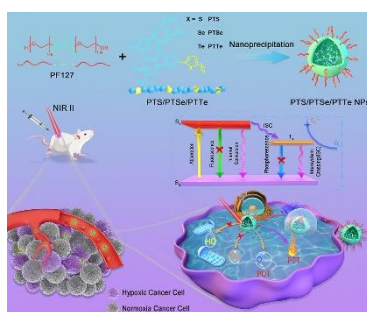


Fig. 1 Schematic illustration of the preparation of PTS, PTSe, and PTTe NPs, and used as NIR-II type-I PDT/PTT photosensitizers under the hypoxic condition.

关键词: 硫族元素; 光热/光动力治疗; 近红外二区; I型光敏剂

参考文献

[1] Wen, K., Tan, H., Peng, Q., Chen, H., Ma, H., Wang, L., Peng, A., Shi, Q., Cai, X., Huang, H.. *Adv. Mater.* **2022**, *34*(7): 2108146.

Neurosynaptic transistor for human visual system

Wei Wen (文巍)¹, and Yunqi Liu^{1, *}

¹Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

*Email: liuyq@iccas.ac.cn

The traditional Von Neumann architecture for processing information is difficult to meet the needs of the big data era, while low-power, small-sized neurosynaptic devices can operate and store information, so that they have received extensive attention. Due to the development of artificial intelligence and robotics, neurosynaptic devices have been given high expectations and requirements. The trend of functionalization, intelligence, and integration of computing and storage is obvious. Human eyes undertake the majority of information assimilation for learning and memory. Transduction of the color and intensity of the incident light into neural signals is the main process for visual perception. Besides light-sensitive elements that function as rods and cones, artificial retinal systems require neuromorphic devices to transform light stimuli into post-synaptic signals. In this work, the human visual system is mimicked by a neurosynaptic transistor which can achieve photodetection, synaptic plasticity, and long-term memory.

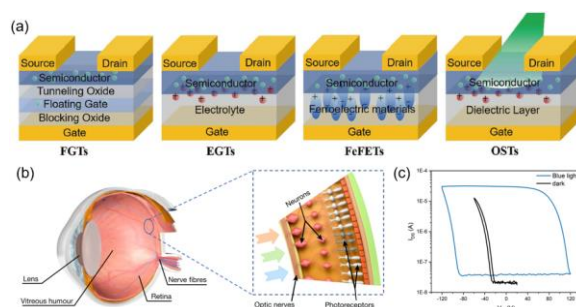


Fig. 1 (a) The types of three-terminal synaptic transistors. Floating-gate transistors; Electrolyte-gate transistors; Ferroelectric field-effect transistors; Optoelectronic synaptic transistors. (b) Schematic of the human visual system. (c) Photo hysteresis of our synaptic transistor.

Keywords: neurosynaptic devices; phototransistors; human visual system

Reference

- [1] W Wen, Y L Guo, and Y Q Liu, Multifunctional neurosynaptic devices for human perception systems. *J. Semicond.*, 2022, 43(5), 051201.
- [2] Gu, L., Poddar, S., Lin, Y. et al. A biomimetic eye with a hemispherical perovskite nanowire array retina. *Nature* 581, 278–282 (2020).
- [3] Wang, H. L., Zhao, Q., Ni, Z. J., Li, Q. Y., Liu, H. T., Yang, Y. C., Wang, L. F., Ran, Y., Guo, Y. L., Hu, W. P., Liu, Y. Q., *Adv. Mater.* 2018, 30, 1803961.

不对称外围锁增强手性硼氮螺烯类圆偏振多重共振 TADF 材料

吴秀刚¹, 黄经纬¹, 王莉¹, 甘祥钦¹, 晏秀勤¹, 王亚飞¹, 朱卫国^{1*}

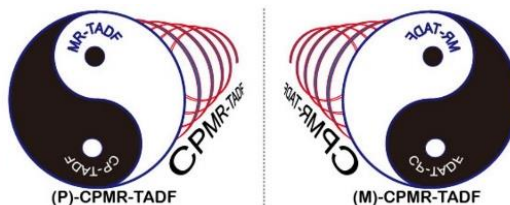
¹常州大学, 江苏省常州市武进区滆湖中路 21 号, 邮编: 213164

*Email: xgwu16@126.com

具有圆偏振发光(CPL)性能的热激活延迟荧光(TADF)材料由于在光学存储、光学防伪、3D 显示等方面的有重要应用, 受到越来越多的关注^[1-2]。基于 CP-TADF 材料的有机电致发光器件被认为是实现 100%光利用率、低功耗的最具希望的发光器件。大多数的 CP-TADF 分子采用了“手性微扰”策略, 通过引入碳手性、轴手性或面手性等手性源能够加速材料合成和性能筛选。但是这样设计的 CP-TADF 分子有其不足: 其一, 由于给体-受体单元空间分离前线轨道电子排布, 导致发光光谱较宽。其二, 手性源没有参与到分子的前线轨道电子排布(例证之一就是最低电子过渡态处对应的 Cotton 效应较小), 导致材料的不对称因子(g 值)普遍很小。

针对上述关键科学问题, 作者联想到近来发展起来的具有鲜明窄带发射特色的多重共振-热活化延迟荧光(MR-TADF)材料, 而且MR-TADF分子独特的短程电荷转移分布特征能, 能够保证整体分子都参与到分子的前线轨道电子排布, 保证在最低电子过渡态处具有较大的Cotton效应, 有望得到较高的g值。如此设计的材料(CPMR-TADF)有望集高效率、圆偏振发光和窄带发射优点于一身, 达到“一石三鸟”的效果^[3]。

The circularly polarized thermally activated delayed fluorescence (CP-TADF) and multiple resonance thermally activated delayed fluorescence (MR-TADF) properties are integrated into a new advanced material, the CPMR-TADF material.



OLEDs based on these CPMR-TADF emitters show excellent performance, attaining a three-in-one advantage: the high efficiency, color purity and circular polarized light simultaneously.

Fig. 1 The design strategy of CPMR-TADF.

关键词: 多重共振热激活延迟荧光; 窄谱带; 螺手性

参考文献

- [1] Xiugang Wu, Bo-Kang Su, Deng-Gao Chen, Denghui Liu, Chi-Chi Wu, Zhi-Xuan Huang, Ta-Chun Lin, Cheng-Ham Wu, Mengbing Zhu, Elise Y. Li, Wen-Yi Hung, Weiguo Zhu, Pi-Tai Chou, *Nat. Photonics*, **2021**, **15**, 780-786
- [2] Jing-Wei Huang, Yu-Chieh Hsu, Xiugang Wu, Sai Wang, Xiang-Qin Gan, Wei-Qiong Zheng, Hu Zhang, Yin-Zhi Gong, Wen-Yi Hung, Pi-Tai Chou, Weiguo Zhu, *J. Mater. Chem. C*, **2022**, DOI: 10.1039/D1TC06165H.
- [3] Xiugang Wu, Jing-Wei Huang, Bo-Kang Su, Sai Wang, Li Yuan, Wei-Qiong Zheng, Hu Zhang, You-Xuan Zheng, Weiguo Zhu, Pi-Tai Chou, *Adv. Mater.*, **2021**, **34**, 2105080.

有机空穴传输材料及光伏应用

吴永真^{1,*}, 张硕¹, 郭焕鑫¹

¹华东理工大学化学与分子工程学院, 上海市徐汇区梅陇路 130 号, 200237

*Email: wu.yongzhen@ecust.edu.cn

有机空穴传输材料作为一类重要的有机半导体材料, 已经在静电复印、激光打印和有机发光二极管等领域取得了大规模商业应用, 同时在新型光伏技术(如染料敏化太阳电池、纯有机光伏电池和钙钛矿太阳电池等)中发挥着重要的作用。不同应用领域对于空穴传输材料的性能要求有所不同, 传统的有机空穴传输材料在电荷输运效率、长期稳定性和应用成本等方面不能满足光伏应用需求, 已成为制约新型光伏技术(特别是钙钛矿太阳电池)走向实际应用的关键瓶颈之一。针对以上问题和挑战, 近年来我们围绕高性能、低成本空穴传输材料的分子砌块设计、薄膜沉积方法、器件应用功能开展了系统研究, 提出独具特色的“平面-正交杂化”材料设计新策略, 发展锚定自组装构筑超薄空穴传输层新方法, 在器件层面拓展了空穴传输材料应用新功能, 取得反式钙钛矿电池效率新记录。本次报告将系统汇报上述研究结果。

关键词: 有机半导体; 空穴传输材料; 薄膜; 钙钛矿太阳电池

参考文献

- [1]. F. Ye, S. Zhang, J. Warby, J. Wu, E. G.-Partida, F. Lang, S. Shah, E. Saglamkaya, B. Sun, F. Zu, S. Shoaee, H. Wang, B. Stiller, D. Neher, W.-H. Zhu, M. Stollerfoht*, Y. Wu*, *Nat. Commun.*, 2022, 13, 7454.
- [2]. H. Guo, H. Zhang, C. Shen, D. Zhang, S. Liu, Y. Wu*, W.-H. Zhu, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 2674–2679.
- [3]. C. Shen, Y. Wu*, H. Zhang, E. Li, W. Zhang, X. Xu, W. Wu, H. Tian, W.-H. Zhu*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58, 3784–3789.
- [4]. H. Guo, C. Liu, H. Hu, S. Zhang, X. Ji, X. Cao, Z. Ning, W.-H. Zhu, H. Tian, Y. Wu*, *Natl. Sci. Rev.*, 2023, DOI: 10.1093/nsr/nwad057.
- [5]. E. Li, C. Liu, H. Lin, X. Xu, S. Liu, S. Zhang, M. Yu, X. Cao, Y. Wu*, W.-H. Zhu, *Adv. Funct. Mater.*, 2021, 31, 2103847.
- [6]. S. Wang, H. Guo, Y. Wu*, *Mater. Futures*, 2023, DOI 10.1088/2752-5724/acbb5a
- [7]. S. Zhang, R. Wu, C. Mu, Y. Wang, L. Han, Y. Wu*, W.-H. Zhu*, *ACS Mater. Lett.*, 2022, 4, 1976–1983.
- [8]. X. Xu, X. Ji, R. Chen, F. Ye, S. Liu, S. Zhang, W. Chen, Y. Wu*, W.-H. Zhu, *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32, 2109968.
- [9]. E. Li, E. Bi, Y. Wu*, W. Zhang, L. Li, H. Chen, L. Han, H. Tian, W.-H. Zhu*. *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1909509
- [10]. D. Zhang*, H. Zhang, H. Guo, F. Ye, S. Liu, Y. Wu*, *Adv. Funct. Mater.*, 2022, 32, 2200174.

二维材料基微型储能器件

吴忠帅^{1,*}

¹中国科学院大连化学物理研究所, 辽宁省大连市沙河口区中山路 457 号, 116023

*Email: wuzs@dicp.ac.cn

针对可穿戴与微电子系统用储能器件的重大需求, 报告人围绕微型电化学能源材料与器件的关键科学问题, 开展了深入系统研究。研制出与平面化微器件特性相匹配的高活性二维赝电容材料; 建立了高效微电极-耐高压电解质强界面作用规律, 揭示了离子多方向传质反应机制, 创制出高性能、柔性化、集成化微型储能器件及微能源系统。

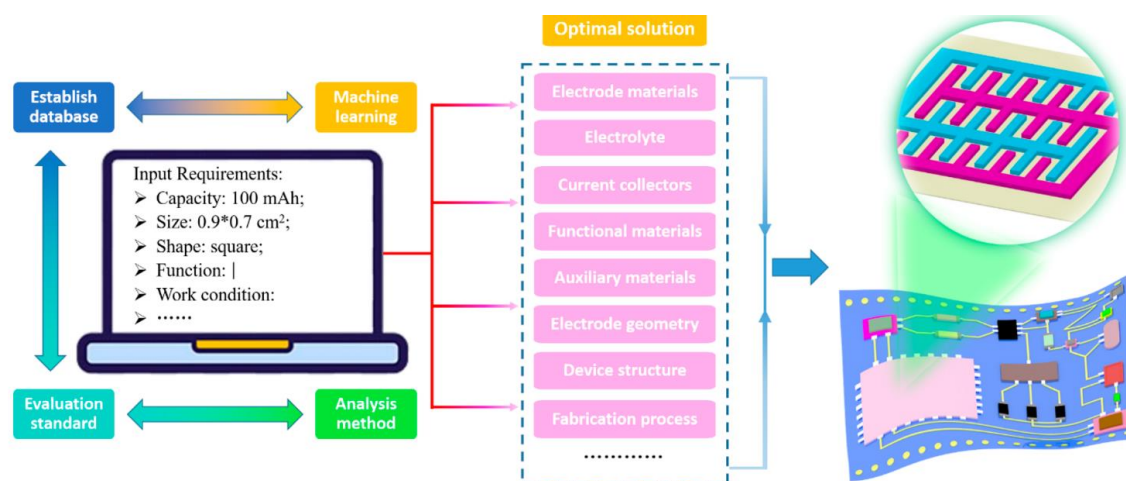


Fig. 1 Ideal construction process of digital microscale electrochemical energy storage devices.

关键词: 微型电化学能源材料与器件; 二维材料; 关微电极; 微型储能器件; 微能源系统

参考文献

- [1] Meng, C.; Zhou, F.; Liu, H.; Zhu, Y.; Fu, Q.; Wu, Z.-S. *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*: 1706.
- [2] Shi, X.; Das, P.; Wu, Z.-S. *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*: 267.
- [3] Ma, J.; Zheng, S.; Chi, L.; Liu, Y.; Zhang, Y.; Wang, K.; Wu, Z.-S. *Adv. Mater.* **2022**, *34*: 2205569.
- [4] Liu, Y.; Zheng, S.; Ma, J.; Wang, X.; Zhang, L.; Das, P.; Wang, K.; Wu, Z.-S. *Adv. Energy Mater.* **2022**, *12*: 2200341.
- [5] Zheng, S.; Wang, H.; Das, P.; Zhang, Y.; Cao, Y.; Ma, J.; Liu, S (Frank).; Wu, Z.-S. *Adv. Mater.* **2021**, *33*: 2005449.

碳龙骨架 - 具有 $d\pi-p\pi$ 共轭的芳香性分子结构基元

夏海平^{1,*}

¹南方科技大学, 广东省深圳市南山区学苑大道 1088 号, 518055

*Email: xiahp@sustech.edu.cn

分子结构基元创新是新物质创造的发动机。然而, 构建全新的分子结构基元很难, 成系列并解决稳定性问题就更难。但若对化学最本质、核心的问题追根溯源, 重新审视现有规则与规律, 揭示其局限性并加以突破, 仍有望创建全新、系列、稳定的结构基元。化学键构筑是化学学科最核心的研究。夏组近20年专注于碳-金属 (C-M) 键构筑这一金属有机学科的核心科学问题。创造性地运用自己独特的寡聚炔链和金属源结合¹, 不断挑战构筑C-M键数量的极限, 取得了系列创新成果。最终, 发现了“同花顺”式的全新芳香结构基元系列 (图1)²及其聚合物 (图2)³, 建立了“碳龙化学”²。这类具有 $d\pi-p\pi$ 共轭特征的化合物稳定性好、兼具溶解性和加工性, 具有独特的光、声、电、磁、热等物理特性⁴。

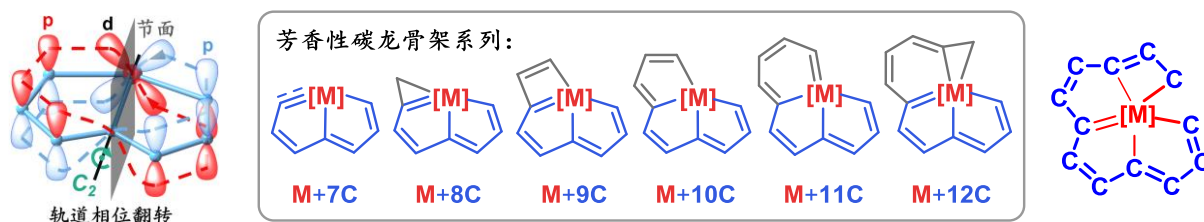


图1. 碳龙化学发现的全新分子结构基元及其独特芳香性 (违反休克尔规则)

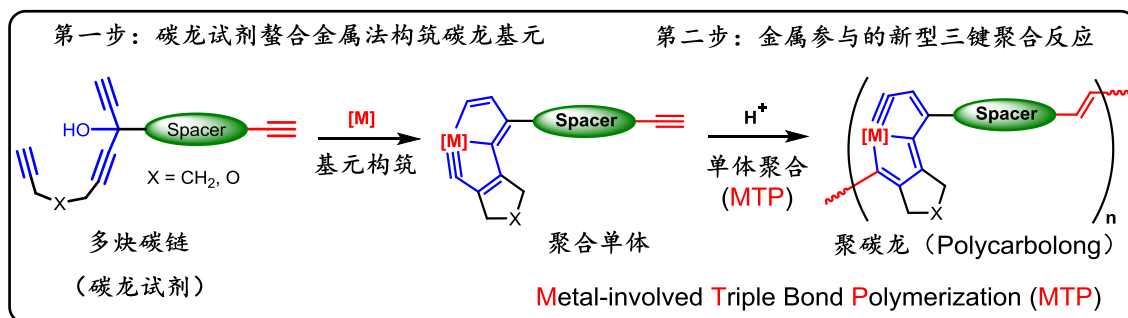


图2. 碳链整合法构筑碳龙骨架及新型聚合反应

关键词: 分子结构基元; 碳龙骨架; 聚碳龙; π 共轭分子; 芳香性

参考文献

- [1] Zhu, C.; Li, S.; Luo, M.; Zhou, X.; Niu, Y.; Lin, M.; Zhu, J.; Cao, Z.; Lu, X.; Wen, T.; Xie, Z.; Schleyer, P. v. R.; Xia, H. *Nat. Chem.* **2013**, *5*: 698.
- [2] Zhu, C.; Xia, H. *Acc. Chem. Res.* **2018**, *51*: 1691.
- [3] Chen, S.; Peng, L.; Liu, Y.; Gao, X.; Zhang, Y.; Tang, C.; Zhai, Z.; Yang, L.; Wu, W.; He, X.; Liu, L. L.; He, F.; Xia, H. *PNAS* **2022**, *119*: e2203701119.
- [4] Luo, M.; Li, Q.; Chen, D.; Xia, H. *Acc. Chem. Res.* **2023**, DOI: 10.1021/acs.accounts.2c00750.

Highly efficient electron-transporting materials for OLEDs

Haoqing Guo, Zhenyu Tang, Zhijian Chen and Lixin Xiao (肖立新)*

Department of Physics, Peking University, Beijing, China

E-mail: lxxiao@pku.edu.cn

[1] The electron-transport material (ETM) is one of the key factors to determine the efficiency and stability of organic light-emitting diodes (OLEDs). An ideal ETM requires high ET mobility, good exciton confinement as well as feasible charge injection from the anode. Technically, a high triplet energy (T_1) is necessary for good exciton confinement, which can be achieved by limited molecule conjugation structures.

[2] Terpyridine (TPY) intrinsically possesses stronger electron-accepting character than pyridine, but it was seldom used as ETM in OLED. We once reported a deep-blue emitter of DTPF by using TPY to improve its ET property. To further improve the thermal stability of DTPF, a rigid twisted spirobifluorene could be introduced to replace fluorene. Moreover, with sp^3 carbon and non-coplanar structure, spirobifluorene could prevent the intermolecular interaction to achieve high T_1 . Here, a novel ETM with a “(A)_n-D-(A)_n” structure of 27-TPSF is synthesized by combining electron-withdrawing TPY moieties with rigid spirobifluorene, and long-lived TADF-PhOLEDs with ultimate device efficiencies were reported. By using Ir(mppy)₃ ($T_1 = 2.4$ eV) as the green phosphorescent emitter and a TADF host, the optimized device with 27-TPSF as ETM exhibits a V_{on} of 2.4 V, a $\eta_{ext, max}$ of 24.5%, and a half-life (T_{50}) of 121 hours at initial luminance of 10,000 $cd\ m^{-2}$, corresponding to 6,804 hours at 1,000 $cd\ m^{-2}$ and 382,636 hours at 100 $cd\ m^{-2}$, which are much better than the device with a commercialized ETM of DPPyA. Additionally, by adopting an emitter with preferable horizontal orientations, even higher $\eta_{ext, max}$ of 28.2% and a maximum power efficiency ($\eta_{PE, max}$) of 129.3 $lm\ W^{-1}$ were realized. These results indicate that the integration of TPY and spirobifluorene to form “(A)_n-D-(A)_n” structure is a promising way to design an ETM, with TPY moieties to facilitate charge transport and guarantee high T_1 while the spirobifluorene moiety to enhance thermal stability.

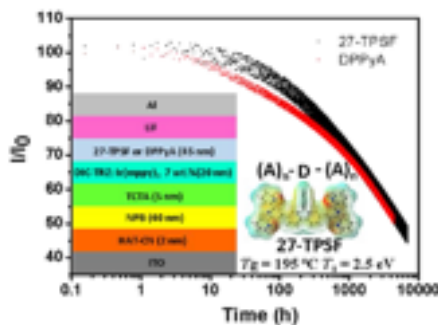


Fig. 1. Long-lived highly efficient electron-transporting material for OLED

Keywords: Electron transporting material; lifetime; OLED; Spirobifluorene; Terpyridine

Reference

[1] L. Xiao et al, *Adv. Mater.* **2009**, 21, 1271; **2011**, 23, 926; *Adv. Funct. Mater.* **2013**, 23, 1323; **2018**, 28, 1800429; *Adv. Electron. Mater.* **2015**, 1, 1400034; *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, **2012**, 4, 2877; *J. Mater. Chem.* **2011**, 21, 19058. *J. Mater. Chem. C* **2018**, 6, 10276.

溶液加工有机发光和感光器件

谢国华^{1,*} 唐扬¹, 杨楚罗¹

¹ 武汉大学化学与分子科学学院, 武汉市武昌区八一路 299 号, 430072

*Email: guohua.xie@whu.edu.cn

溶液加工制备有机光电功能器件具有工艺简单、成本低廉、材料利用率高等优点。为了适应载流子注入和传输以及激子限制, 往往需要采用多层薄膜结构方案。但是连续的多层薄膜溶液加工对界面的抗溶性有着苛刻的要求, 为了避免常规正交溶剂选择的限制, 开发转移印刷有机薄膜技术可以实现非真空法、多层薄膜的连续可控制备。

我们提出了界面能调控的方案, 在发光层下生长合适的籽层兼容空穴传输和能量传递, 使待转移发光层与转移印刷聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 载体和底下的籽层形成合适的界面粘附能差 (如图1所示), 首次实现在小分子薄膜上生长界面清晰的聚合物薄膜, 并大幅提升聚合物电致发光器件的性能。

为了克服待转移印刷功能薄膜与牺牲衬底之间的界面粘附能匹配问题, 我们提出了水溶性牺牲层的解决方案, 有效降低了待转移薄膜与水溶性牺牲层之间的界面粘附能, 大大提高了转移印刷的成功率, 结合激光刻蚀技术, 开发了高速、高效、稳定的横向光电导有机传感器。

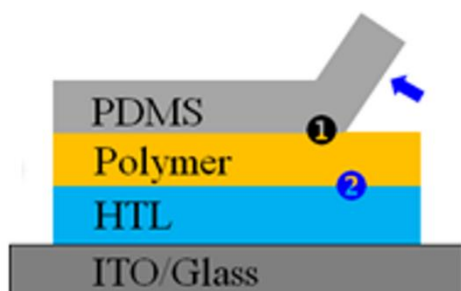


Fig. 1 转移印刷有机薄膜过程示意图

关键词: 溶液加工; 有机发光器件; 有机光电探测器; 转移印刷;

参考文献

[1] Zhou, Y.; Khan, T.; Shim, J.; Dindar, A.; *J. Mater. Chem. A* **2014**, *2*, 3492..

[2] Yang, T.; Gao, Y.; Xie, G.; Yang, C.; *Nanoscale Horiz.* **2020**, *5*, 144.

有机太阳能电池功能层印刷制备和模组研究

谢志元^{1,*}

¹中国科学院长春应用化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室,

长春市人民大街 5625 号, 130022

*Email: xiezy_n@ciac.ac.cn

高分子薄膜太阳能电池具有重量轻、可弯折、可半透明、可印刷制备等优点,近年来得益于高性能给受体光伏材料的不断涌现,光伏器件的能量转换效率显著提升。柔性有机光伏电池的规模制备需要解决界面材料和透明电极材料的可印刷制备问题[1-3]。同时,给体/受体共混组成的活性层在印刷过程中薄膜干燥和相分离行为明显区别于旋涂方式制备的活性层薄膜,迫切需要发展基于印刷方式调控活性层相分离结构的方法,而且未来规模制备需要开发非卤代绿色溶剂加工体系。本报告将介绍我们采用高温刮涂结合非卤代溶剂调控PM6:Y6相分离结构的方法[4]。研究发现采用二甲苯(o-XY)作为溶剂常温刮涂制备PM6:Y6活性层时,由于薄膜干燥时间较长导致受体Y6形成大尺度聚集,器件性能较差;通过升高刮涂基板温度和引入非卤代添加剂二甲基萘可有效调控了活性层薄膜的相分离结构,讨论了相关机理。进一步使用LBL顺序刮涂和三元策略制备了基于非卤溶剂1,2,4-三甲苯(TMB)刮涂的有机太阳能电池及模组,模组的面积为28.15 cm²和几何填充因子达到93.6%,模组的能量转换效率达到14.4%。

关键词: 有机太阳能电池; 模组; 印刷; 形貌。

参考文献

- [1] Liu, J.; Wu, J.; Shao, S.; Deng, Y.; Meng, B.; Xie, Z.; Geng, Y.; Wang, L.; Zhang, F. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2014**, *6*: 8237.
- [2] Zhang, X.; Wu, J.; Wang, J.; Yang, Q.; Zhang, B.; Xie, Z. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2016**, *8*: 34630.
- [3] Liu, H.; Li, Y.; Wu, J.; Fu, Y.; Tang, H.; Yi, X.; Xie, Z. *J. Mater. Chem. C* **2021**, *9*: 9914.
- [4] Li, Y.; Liu, H.; Wu, J.; Tang, H.; Wang, H.; Yang, Q.; Fu, Y.; Xie, Z. *Appl. Mater. Interfaces* **2021**, *13*: 10239.
- [5] Li, Y.; Wu, J.; Tang, H.; Yi, X.; Liu, Z.; Yang, Q.; Fu, Y.; Liu, J.; Xie, Z. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, *14*: 31054.

从理论角度看扫描隧道显微镜对表面物种的标定

段赛¹, 徐昕^{1,*}

¹复旦大学化学系, 上海市淞沪路 2005 号新江湾校区, 200438

*Email: xxchem@fudan.edu.cn

扫描隧道显微镜 (STM) 技术的实空间成像分辨率能够达到埃级别, 自从其发明以来就成为了对材料表面物种进行精确表征的强有力的工具。尽管实验技术经历了飞速的发展, 包括对针尖的修饰以及利用隔绝层对衬底解耦等, 用来提高测量的分辨率, 深入理解与验证针尖和衬底隧道结内分子的丰富特性有赖于理论的完善与发展。从理论上看STM中测量的针尖和衬底之间的隧穿电流可以用微扰理论进行精确的描述。在这个报告中, 将介绍我们小组在Tersoff-Hamann近似下发展的可描述所有STM实验参数的从头算模拟框架。通过将该框架下的模拟结果和高精度STM实验成像进行对比, 指认了Cu(111)上六聚体水簇的原位吸附新构型^[1]。进一步利用高精度密度泛函XYGJOS, 证明了该构型同时也是全局能量最稳定构型, 解决了水-固界面近二十多年的指认难题^[1]。我们还高度重现了二乙炔基联吡啶前驱体以及其表面反应产物在Au(111)上的STM图像, 为理解氮参杂一维线型石墨炔聚合的独特内在机理奠定了基础^[2]。此外, 针对周期性边界条件难以处理表面带电体系的难题, 我们小组进一步发展了在Bardeen近下能够精确模拟各种针尖态以及不同成像模式下任意分子电荷态的普适簇模型STM框架^[3], 为研究最近涌现的STM针尖下各种复杂的, 尤其是涉及到离子态的, 隧穿过程铺平了道路。已上结果表明, 通过高精度理论模拟和实验测量相结合, 利用STM成像能够对表面物种的电子和几何结构进行细致的表征, 为分子材料和器件的设计提供新思路。

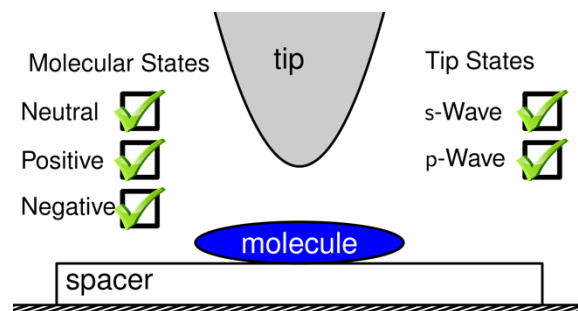


Fig. 1 Schematic of capabilities of the general STM simulation frameworks.

关键词: STM成像理论框架; 水-固界; 线型石墨炔聚合; 带电体系

参考文献

- [1] Duan, S.; Zhang, I. Y.; Xie, Z.; Xu, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*: 6902.
- [2] Li, X.; Niu, K.; Duan, S.; Tang, Y.; Hao, Z.; Xu, Z.; Ge, H.; Rosen, J.; Björk, J.; Zhang, H.; Xu, X.; Chi, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, DOI:10.1021/jacs.2c11799.
- [3] Duan, S.; Tian, G.; Xu, X. *JACS Au* **2023**, *3*: 86.

Comprehensive scan for nonmagnetic Weyl semimetals with nonlinear optical response

Qiunan Xu (许秋楠)^{1,2,*}, Yang Zhang^{1,3}, Klaus Koepf³, Wujun Shi^{1,4}, Jeroen van den Brink³, Claudia Felser^{1,5} and Yan Sun¹

¹Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids Address: Dresden 01187, Germany

²Qingdao Institute for Theoretical and Computational Sciences, Shandong University
Address: Qingdao 266237, China

³Leibniz Institute for Solid State and Materials Research Address: Dresden 01069, Germany

⁴School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University Address: Shanghai
200031, China.

⁵Center for Nanoscale Systems, Faculty of Arts and Sciences, Harvard University
Address: 11 Oxford Street, LISE 308, Cambridge, MA 02138, USA.

*Email: xuqiunan91@email.sdu.edu.cn

First-principles calculations have recently been used to develop comprehensive databases of nonmagnetic topological materials. However, the symmetry-based approach to identifying topological states cannot be applied to Weyl semimetals (WSMs). WSMs with Weyl points in arbitrary positions are absent from the well-known databases. In this work, we develop an efficient algorithm to search for Weyl points automatically and establish a database of nonmagnetic WSMs with Weyl points based on the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). In total, 46 Weyl semimetals were discovered to have nearly clean Fermi surfaces and Weyl points within 300 meV of the Fermi level. Nine of them are chiral structures which may exhibit the quantized circular photogalvanic effect. In addition, the nonlinear optical response is studied and the giant shift current is explored, which could be used in solar cell. Besides nonmagnetic WSMs, our powerful tools can also be used in the discovery of magnetic topological materials.

Keywords: topological materials, nonmagnetic Weyl semimetals, bulk photovoltaic effect, shift current, high-throughput calculations.

Reference

Qiunan Xu, Yang Zhang, Klaus Koepf, Wujun Shi, Jeroen van den Brink, Claudia Felser and Yan Sun, npj Computational Materials (2020) 6:32.

Interface terminal group regulated organic phototransistors with tunable persistent and switchable photoconductivity

Di Xue (薛娣)^{#1}, Yingying Zhang^{#1}, Weijie Gong¹, Yao Yin¹, Zi Wang^{2*}, Lizhen Huang^{1*} & Lifeng Chi^{1,3*}

¹Institute of Functional Nano & Soft Materials (FUNSOM), Jiangsu Key Laboratory for Carbon-Based Functional Materials & Devices, Soochow University, 199 Ren'ai Road, Suzhou, 215123, Jiangsu, P.R. China

²Gusu Laboratory of Materials, 388 Ruoshui Road, Suzhou 215123, P.R. China

³Macao Institute of Materials Science and Engineering (MIMSE), MUST-SUDA Joint Research Center for Advanced Functional Materials, Macau University of Science and Technology, Taipa 999078, Macao, China

*Email: chilf@suda.edu.cn; lzhuang@suda.edu.cn; wangzi2020@gusulab.ac.cn

To achieve excellent photoresponse and superior photo-gain in organic phototransistors, a common and effective strategy is to modulate the trapping effect with the purpose of reducing recombination or prolong lifetime of the photogenerated charge carriers. However, introducing trapping sites delicately is challenging and might sacrifice the response rate together with a typical persistent photoconductivity. Here, we demonstrate a facile strategy for achieving high photoresponsive organic phototransistors with both persistent and switchable photoconductivity features via interface terminal group regulation. Through varying the terminate groups of SAMs from strong electron withdrawing group -F, neutral -CH₃ to electron donating -NH₂ on the dielectric surface, we realize both the minority carrier trapping and majority carrier trapping in the organic phototransistor based on C8-BTBT active layer. Such a tunable, excellent photoresponse property enables the convenient exploration of organic phototransistor to satisfy different application requirements.

Keywords: Organic phototransistor, surface modification, trapping, persistent photoconductivity

Reference

[1] Xue, D.; Zhang, Y.; Gong, W.; Yin, Y.; Wang, Z.; Huang, L.; Chi, L. *Sci. China Chem.* 2022, 65: 145.

面向物联网系统供能的室内光伏电池

薛丁江^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: djxue@iccas.ac.cn

近年来, 蕴含了万亿美元市场前景的物联网领域发展迅猛, 其中数以亿计的低功耗终端无线传感器需要移动电源驱动。室内光伏电池通过吸收室内环境中低强度光输出微瓦到毫瓦的电能, 被公认为是驱动物联网低功耗无线传感器的最佳供电方式之一。本课题组率先挖掘了世界首个但一百多年来因其带隙(~1.9 eV)远大于太阳能电池最佳带隙(~1.4 eV)而被忽视的硒电池在新兴室内光伏领域的独特优势。具体包括: (i) 带隙位于室内光伏最佳带隙区间(1.8-1.9 eV), 室内光伏理论效率极限达55%; (ii) 绿色无毒(硒为人体必需微量元素), 满足室内应用场景要求; (iii) 稳定强(光伏三方相为热力学最稳定相、单质非极性键赋予其优异湿度稳定性、高氧化活化能赋予其强氧气稳定性); (iv) 成本低廉(17万/吨, 换算成1微米膜厚时, 成本仅0.8元/平方米)。本课题组现已制备出室内光伏效率达15.1%(1000 lux 照度下)的硒薄膜光伏电池, 该性能优于当前主流商业化非晶硅室内光伏电池效率(~10%), 成功驱动了物联网系统主流终端无线传感器(如射频RFID标签)。本报告将重点介绍课题组近两年来在硒基本物性表征、薄膜制备和器件性能优化方面的系列工作。

关键词: 硒; 室内光伏; 薄膜制备; 传感器供电

参考文献

- [1] *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, **145**: 5872.
- [2] *Sci. Adv.* **2022**, **8**: eadc9923.
- [3] *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61**: e202204148.
- [4] *Nat. Commun.* **2021**, **12**: 670.
- [5] *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143**: 9664.

新型非掺杂空穴传输材料实现高效稳定钙钛矿太阳能电池

薛启帆*, 黄飞, 曹镛

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室 广东广州 510640

*Email: qfxue@scut.edu.cn

报告人创新性地提出一种D-A- π -A-D分子构型，用于制备高效且低成本的非掺杂空穴传输材料（图1）。通过分子构型设计，赋予了目标分子DTB-FL良好的层状分子堆积排列以及延伸的 π 共轭长度，确保其优异的空穴传输性能。此外，基于DTB-FL所制备非掺杂空穴传输层展现出良好的表面钝化效果以及匹配的界面能级排列，使得空穴传输层/钙钛矿界面处的非辐射复合得到有效抑制，电荷的分离与提取效率大幅提升。基于DTB-FL所制备的钙钛矿电池实现了21.5%的光电转换效率，是当时基于非掺杂小分子空穴传输材料钙钛矿电池器件的最高效率之一。在稳定性方面，DTB-FL材料展现出的高表面抗水性、良好的薄膜形貌质量以及增强的表面缺陷钝化效果，使得所制备器件在湿度、光照和高温环境下均呈现出优异的长效稳定性。同时，我们采用交替的苯并二噻吩和双噻吩酰亚胺单元构建了两种新型无掺杂的聚合物空穴传输材料PBTI和PFBTI。合适的能级、良好的成膜性、高的空穴迁移率和表面钝化效应使PBTI和PFBTI成为出色的空穴传输材料用于钙钛矿太阳能电池。

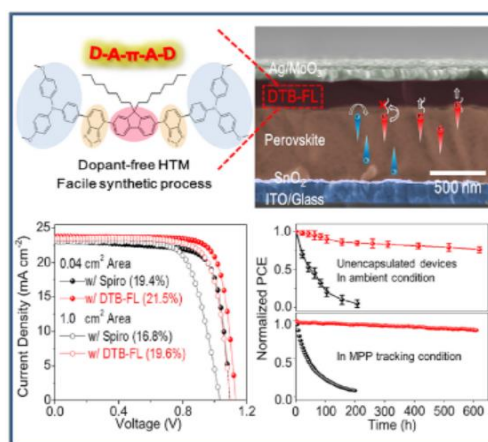


Fig. 1 Device performance of dopant-free HTL in perovskite solar cells

关键词： 有机/聚合物空穴传输材料；钙钛矿太阳能电池；非掺杂；缺陷钝化

参考文献

- [1] Yuanqing Bai, Zhisheng Zhou, Qifan Xue*, Chunchen Liu, Ning Li, Haoran Tang, Jiabin Zhang, Xinxin Xia, Jie Zhang, Xinhui Lu, Christoph J. Brabec, Fei Huang*, *Advanced Materials*, 2022, 10.1002/adma.202110587.
- [2] Tianqi Niu, Weiya Zhu, Yiheng Zhang, Qifan Xue*, Xuechen Jiao, Zijie Wang, Yue-Min Xie, Ping Li, Runfeng Chen, Fei Huang, Yuan Li*, Hin-Lap Yip*, Yong Cao. *Joule* 2021, 5, 249.

长余辉发光配合物研究

闫东鹏¹¹北京师范大学化学学院

*Email: yandp@bnu.edu.cn

近年来,以室温磷光和热活化延迟荧光为代表的分子基发光配合物材料因其结构可调,发光颜色丰富,易于加工,利于实现柔性化等特点,吸引了各国学者的研究兴趣。我们将介绍近期基于分子杂化方法实现配合物延时发光增强的一些具体例子和在这一领域的研究进展。^[1-9]

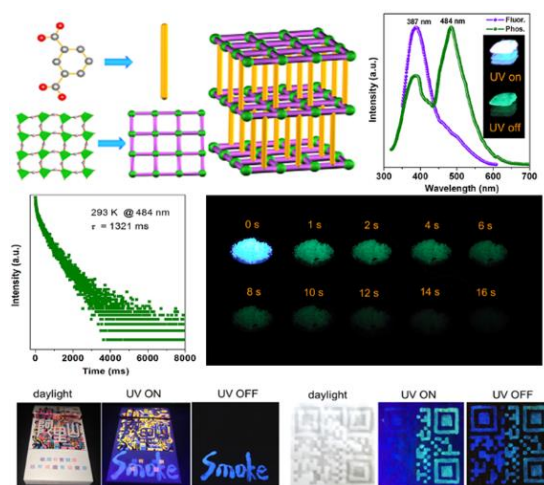


Fig. 1 construction of long-afterglow metal-organic complexes

关键词: 磷光; 延迟荧光; 配合物; 杂化材料

参考文献

- [1] Yang, X.; Yan, D. *Chem. Sci.* **2016**, *7*: 4519; *Adv. Opt. Mater.* **2016**, *4*: 897; *Chem. Sci.* **2019**, *10*: 4567.
- [2] Gao, R.; Yan, D. *Chem. Sci.* **2017**, *8*: 590; *Chem. Commun.* **2017**, *53*: 5408; *Nano Res.*, **2017**, *10*: 3606.
- [3] Yang, X.; Lin, X.; Zhao, Y.; Zhao, Y. S.; Yan, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*: 7853.
- [4] Gao, R.; Mei, X.; Yan, D.; Liang, R.; Wei, M. *Nat. Commun.* **2018**, *9*: 2798.
- [5] Zhou, B.; Yan, D. *Adv. Funct. Mater.* **2019**, *29*, 1807599; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*: 15128.
- [6] Liu, S.; Fang, X.; Lu, B.; Yan, D. *Nat. Commun.* **2020**, *11*: 4649.
- [7] Zhou, B.; Xiao, G.; Yan, D. *Adv. Mater.* **2021**, *33*: 2007571
- [8] Gao, R.; Kodaimati, M. S.; Yan, D., *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 5564.
- [9] Ma, Y. J.; Fang, X.; Xiao, G.; Yan, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202114100.
- [10] Zhou, B.; Qi, Z.; Yan, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202208735.

有机微纳激光中的三重态损耗抑制

闫永丽*, 周忠豪, 任昂, 赵永生

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: ylyan@iccas.ac.cn

有机电泵浦激光的实现是纳米光子学真正走向应用的前提。然而, 作为国际公认的学术前沿和难题, 实现电泵浦激光一大难点是三重态损耗引起的电注入效率低下及“激光死亡”现象。我们发展了多种策略抑制三重态相关损耗: 提出了热活化的受激发射, 首次从实验上证明了有机限域体系中的三线态激子可以被反向系间窜跃过程捕获并转为单线态激子参与受激辐射; 进而把这种独特的激子转化机制应用于更具有挑战性的有机准连续激光领域, 成功获得了准连续区间内的有机激光。近来, 我们利用强耦合翻转了单重态-三重态能级, 构建了无势垒的反向系间窜跃, 显著提升了电注入效率, 成功观测到了电注入过程中激子极化激元的受激散射。

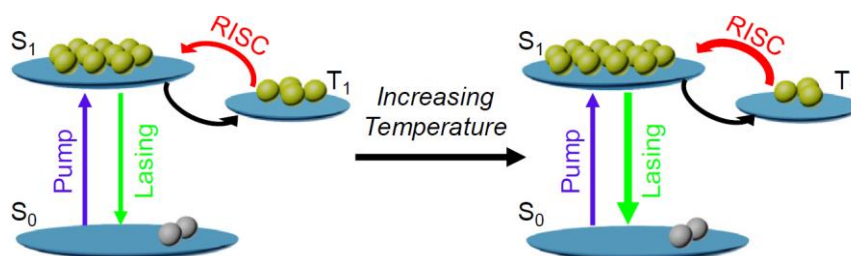


Fig. 1 热活化微纳激光

关键词: 微纳激光; 延迟荧光; 反向系间窜跃; 强耦合; 能级反转

参考文献

- [1] Zhou, Z.; Qiao, C.; Wang, K.; Wang, L.; Liang, J.; Peng, Q.; Wei, Z.; Dong, H.; Zhang, C.; Shuai, Z.; Yan, Y.; Zhao, Y. *S. Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*: 21677.
- [2] Zhang, T.; Zhou, Z.; Liu, X.; Wang, K.; Fan, Y.; Zhang, C.; Yao, J.; Yan, Y.; Zhao, Y. *S. J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*: 20249.
- [3] Ren, A.; Tang, J.; Jiang, Z.; Yan, Y.; Yao, J.; Zhao, Y. *S. Adv. Opt. Mater.* **2022**, *10*: 2201126.

富勒烯异构体对锡基钙钛矿太阳能电池性能的影响

杨成林¹, 支鸿富¹, 吕明升¹, 王军方¹, 高震¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

锡基钙钛矿通过锡离子代替铅离子, 有效地解决了铅毒性问题。目前研究的锡基钙钛矿的光伏器件绝大多数都是p-i-n结构。而富勒烯材料具有离域的三维 π 电子, 较强的电子接受能力, 被广泛地应用到锡基太阳能电池作为电子传输层。双取代的富勒烯衍生物因其匹配的LUMO能级, 会更合适在锡基钙钛矿电池中作为电子传输层使用。但双加成富勒烯衍生物目前面临的一个问题在于在于合成产物具有异构体。异构体的存在会提高电子传输层的能量无序度, 拉低费米能级水平, 弱化了富勒烯双加成衍生物的能级优势。且这种不均一的异构体混合在一起, 无疑会影响分子的堆积方式, 电子传输性能。我们以NCBA为例, 分离NCBA的四种异构体, 探究对锡基钙钛矿光伏器件的性能影响。此外, 我们惠分子占位的方式, 定向合成e-NCBA的异构体, 简化了分离异构体的繁琐步骤, 并省略了HPLC使用昂贵的富勒烯分离柱。通过直接将富勒烯衍生物异构体应用于锡基钙钛矿光伏器件, 得到了更优异的器件性能。

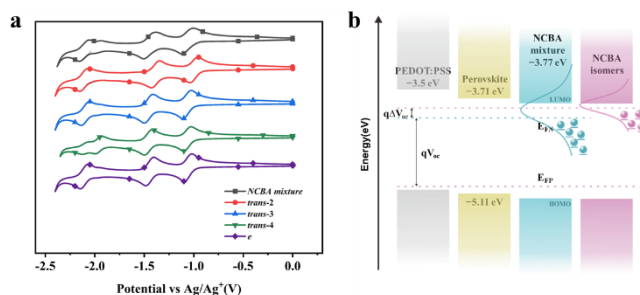


Fig. (a) Cyclic voltammograms of the NCBA isomers in o-dichlorobenzene:acetonitrile (v:v=5:1) with 0.1 M NBu₄PF₆.

(b) Energy-level scheme of PSCs based on different ETL.

关键词: 锡基钙钛矿; 富勒烯; 异构体; 选择性合成

参考文献

- [1] Meng, X.; Zhao, G.; Xu, Qi.; Li, Y*. *Adv. Funct. Mater.*, **2014**, 24, 158–163.
 [2] Zuo, X.; Geng, X.; He, D.; Ding, L*. *Energy Environ. Sci.*, **2016**, 9, 2114.

窄光谱有机发光材料及器件

胡宇轩、曹啸松、邹洋、黄忠衍、李凯、缪景生、杨楚罗*

深圳大学材料学院, 深圳 518061

*Email: clyang@szu.edu.cn

多重共振诱导的热活化延迟荧光 (MR-TADF) 材料在高效、窄谱带有机发光二极管 (OLED) 中显示出巨大的潜力。本报告将介绍我们近几年在 BN 稠环 MR-TADF 材料和 OLED 器件上的进展。

(1) 调控 MR-TADF 材料的光色。利用外围修饰、共轭拓展等策略设计合成了从深蓝到红光的窄谱带发光材料, 相应的 OLED 器件取得了优异的性能。

(2) 抑制 MR-TADF 材料的发光浓度猝灭。利用在外围引入“位阻”基团, 将多重共振母核包裹在中间的策略, 实现了窄发射光谱并抑制聚集诱导发光猝灭的目的。相应 OLED 器件性能获得大幅提升, 在掺杂浓度为 1-30% 的区间内光谱几乎无变化, 发光半峰宽仅为 25 纳米; 在 5% 掺杂浓度下 OLED 器件实现了 40% 的发光效率。

(3) 重原子效应促进 MR-TADF 材料的反向系间窜跃。将 S、Se 原子嵌入硼氮杂多重共振稠环骨架, 该 MR-TADF 材料具有约 100% 的光致发光量子产率和快速的 RISC 速率 (k_{RISC})。将其作为发光客体的 OLED 表现出高达 36.8% 的外量子效率 (EQE) 和超低的效率滚降。将 MR-TADF 材料用作敏化剂制作了高性能的超荧光 (HF) OLED 器件, 其 EQE 高达 40.5%。

关键词: OLED, 多重共振, 发光材料, 重原子效应

参考文献

- [1] Y. Qi, W. Ning, Y. Zou, X. Cao, S. Gong, C. Yang, *Adv. Funct. Mater.*, 2021, 31, 2102017.
- [2] X. Lv, J. Miao, M. Liu, Q. Peng, C. Zhong, Y. Hu, X. Cao, H. Wu, Y. Yang, C. Zhou, J. Ma, Y. Zou, C. Yang, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e202201588.
- [3] Y. Zou, J. Hu, M. Yu, J. Miao, Z. Xie, Y. Qiu, X. Cao, C. Yang, *Adv. Mater.*, 2022, 34, 2201442.
- [4] P. Jiang, J. Miao, X. Cao, H. Xia, K. Pan, T. Hua, X. Lv, Z. Huang, Y. Zou, C. Yang, *Adv. Mater.*, 2022, 34, 2106954.
- [5] Y. Hu, J. Miao, T. Hua, Z. Huang, Y. Qi, Y. Zou, Y. Qiu, H. Xia, H. Liu, X. Cao, C. Yang, *Nat. Photon.* 2022, 16, 803.
- [6] X. Cao, K. Pan, J. Miao, X. Lv, Z. Huang, F. Ni, X. Yin, Y. Wei, C. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 22976.

面向柔性电子的有机晶态材料

杨方旭¹

¹ 天津大学，天津市南开区卫津路 92 号，300072

*Email: yangfangxu@tju.edu.cn

有机单晶材料有望在柔性电子器件的物理机制、核心性能、电路应用等方面带来突破。基于此，我们以发展高性能有机单晶柔性电子器件及其集成阵列为目标，通过聚焦单晶生长机理、器件物理机制、以及柔性集成策略方面的关键科学和技术问题，取得了系列创新性研究成果，主要包括：1、基于液态衬底策略生长了多种类型的大面积少层数二维有机晶体薄膜，为柔性电子应用奠定了材料基础；2、基于构建单晶界面策略分别实现了电荷输运和激子物理的操控，突破了有机光电器件的核心性能；3、基于自下而上自组装策略制备了高均一性、高集成度的柔性电子器件集成阵列。近五年共发表 SCI 论文 34 篇，其中以第一和通讯作者发表论文 18 篇，包括 *Adv. Mater.* 5 篇等，论文引用 1300 余次。

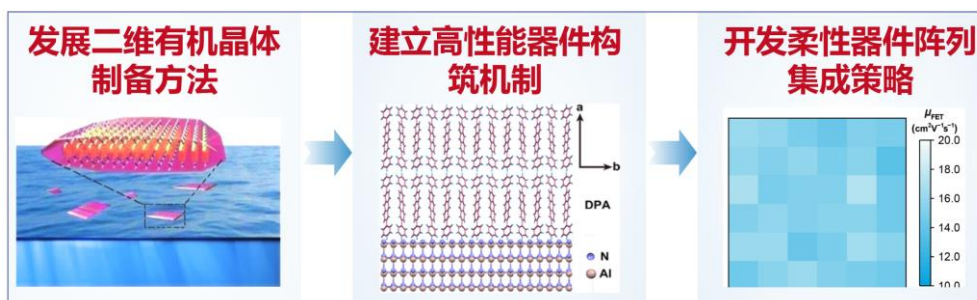


Fig. 1 We are engaged in organic single crystal thin film transistors for flexible electronic applications, and conduct research from three aspects: preparation of two-dimensional organic crystals, high-performance device construction and flexible device integration.

关键词： 有机场效应晶体管；有机半导体单晶；柔性电子；有机电子

参考文献

- [1] Fu B, Yang F, Sun L, et al. Challenging Bendable Organic Single Crystal and Transistor Arrays with High Mobility and Durability toward Flexible Electronics. *Adv. Mater.* 2022, 34, 2203330.
- [2] Zhu X, Yan Y, Sun L, et al. Negative Phototransistors with Ultrahigh Sensitivity and Weak-Light Detection Based on 1D/2D Molecular Crystal p-n Heterojunctions and their Application in Light Encoders. *Adv. Mater.* 2022, 34, 2201364.

赋予咪唑聚集诱导荧光和热活化延迟荧光性质，用于高效率非掺杂有机发光二极管

杨阁，冉有，吴祎民，陈民琪，宾正杨*，游劲松*

四川大学化学学院绿色化学与技术教育部重点实验室，成都望江路 29 号，610064

*Email: binzhengyang@scu.edu.cn; jsyou@scu.edu.cn

有机发光二极管(OLED)被认为是具有潜力的固态照明显示技术，作为第三代OLED显示技术的热活化延迟荧光(TADF)材料，在OLED中具有非常广阔的应用前景。由于OLED中聚集状态下分子间相互作用导致的激子猝灭，开发具有聚集诱导发光(AIE)性质和热活化延迟荧光(TADF)性质的发光分子是具有挑战性的。在此，对咪唑衍生物的系统研究首次开发了一系列基于咪唑的高效TADF-AIE发光材料。两个氰基官能团在咪唑基团上的连接可以显著提高吸电子能力，从而实现具有较小单重态-三重态能隙 (ΔE_{ST}) 值的 TADF 发射。同时，在咪唑部分的N₁位引入空间位阻基团可以扭曲咪唑和苯基桥之间的几何形状，从而将咪唑衍生物从聚集诱导猝灭(ACQ)发光性质转变为AIE发光特性。因此，使用这些TADF-AIE分子作为发光层的非掺杂有机发光二极管 (OLED) 表现出出色的天蓝色和绿色发射，外量子效率 (EQE) 高达 20.0%，并且具有低的效率滚降(1000 cd m⁻² 时的 EQE为 16.1%)。这些值代表了所有基于咪唑的 OLED 器件的最佳性能，说明了咪唑衍生物在组装高性能 OLED 中的巨大潜力。

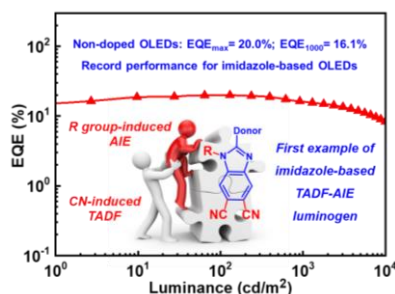


Fig. 1 Design, synthesis and device application of high-performance imidazole derivative light-emitting materials

关键词：聚集诱导荧光；咪唑；非掺杂OLED；热活化延迟荧光

参考文献

[1] G. Yang, Y. Ran, Y. Wu, M. Chen, Z. Bin, J. You, *Aggregate*. 2021, e127.

高迁移率可拉伸有机场效应晶体管器件

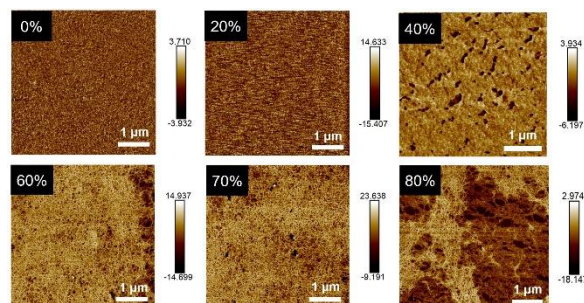
杨辉

天津大学理学院分子光电科学重点实验室

天津市南开区卫津路 92 号，邮编 300072

*Email: yanghui2018@tju.edu.cn

可拉伸有机场效应晶体管器件(OFET)是一类信号转换和信号放大功能优异的电子元器件,具有成本低、质量轻、柔性可拉伸、可溶液加工等优点,在智能传感、生物检测、医学健康、有机集成电路等领域具有广泛的应用前景。目前,如何同时实现 OFET 的高迁移率和高拉伸率,是可拉伸 OFET 领域亟待解决的关键科学技术问题。为了解决上述问题,我们利用纳米限域效应,共混高迁移率聚合物半导体 PDVT-10 和高拉伸率弹性体 SEBS,制备了高迁移率可拉伸的有机半导体薄膜,研究了分子结构、材料组成、聚集结构等对复合材料的拉伸率和迁移率的影响,探究了复合材料的相分离结构对器件性能的构效关系,证明了共混半导体聚合物薄膜的可拉伸性。利用层层转移的方法,制备了高迁移率可拉伸 OFET 器件,其本征迁移率为 $2.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。在高达 150%的应变下,器件的迁移率降低 $1.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$,实验结果表明器件具有良好的可拉伸率和高迁移率,为可拉伸 OFET 在人体电生理信号的长期监测等领域的应用提供了材料基础和技术储备。



关键词: 高迁移率; 可拉伸晶体管; 纳米限域

基于密度泛函分子设计的复合材料电极稳定性预测

杨露茜^{1,2}, 李泽朋^{1,2}, 张启玉¹, 秦晓东^{1,2}, 薛智文¹, 韩颖慧^{1,*}

¹中国科学院大学资源与环境学院, 北京市怀柔区雁栖湖东路1号, 101408

²华北电力大学(保定)环境科学与工程系, 河北省保定市永华北大街619号, 071003

*Email: hanyinghui@ucas.ac.cn

导电聚合物材料因具有优异的使用性能和良好的稳定性, 常被用以制备超级电容器的电极^[1]。大量实验研究了聚合物与金属氧化物复合材料电极的性能, 但理论研究方法鲜有涉及。相较于传统的实验方法, 密度泛函法分子动力学设计模拟计算可以更直接地揭示材料的微观结构。本文提出了一种基于密度泛函分子设计的复合材料电化学稳定性预测方法: 通过构建氧化物与聚合物的界面模型并进行几何优化, 计算了RuO₂、MnO₂、NiO、SrBiO₃等氧化物与PPy、PANI、PTH等聚合物之间的相互作用能, 并分析了它们之间的结合水平。结果表明, RuO₂与PPy的组合是本研究范围内复合材料电极的最佳选择, 它们之间的相互作用能为-6214.431 Kcal/mol。为验证理论计算结果与实际合成过程的一致性, 采用电沉积法在泡沫镍上合成电极材料, 并将其作为工作电极进行长循环充放电测试。结果表明, RuO₂&PPy具有最高的电化学稳定性和最佳的循环寿命。本文的方法可以推广到多元材料耦合的模拟, 计算材料之间的相互作用, 可为后续的电极材料设计进行理论预测和提供参考。

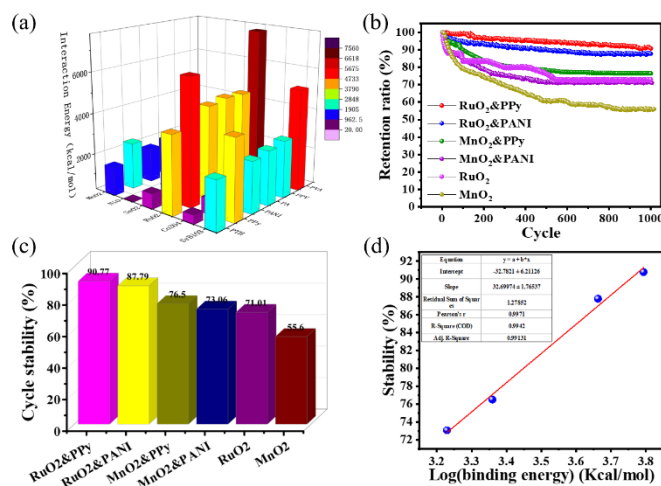


Fig. 1 (a) The interaction energy between six oxides and six polymers; (b) Capacitance changes during 1000 charge and discharge cycles; (c) Capacitance retention after 1000 cycles of charge and discharge; (d) Correlation between capacitance retention and binding energy of composite

关键词: 密度泛函; 分子设计; 超级电容器; 复合材料电极; 电化学稳定性; 结合能

富勒烯基光电功能材料

杨上峰*

中国科学技术大学化学与材料科学学院材料科学与工程系, 合肥, 230026

*Email: sfyang@ustc.edu.cn

富勒烯(fullerene)是继石墨、金刚石之后人类发现的碳的第三种同素异形体, 最早的代表物C₆₀于1985年由Kroto, Curl, Smalley及合作者发现, 并因此荣获了1996年诺贝尔化学奖。富勒烯是封闭笼状分子, 具有独特的物理、化学性质, 在光、电、磁等领域展示了广阔的应用前景。基于富勒烯具有电子亲和力强, 电子迁移率高以及重组能小的特点, 富勒烯功能材料被广泛应用于有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池中的电子传输层、阴极界面层或缺陷钝化剂。我们发展了一系列新型富勒烯衍生物并将其应用于钙钛矿太阳能电池中的电子传输层或钙钛矿光活性层的添加剂等。此外, 我们还开发了新型富勒烯基杂化材料, 拓展了富勒烯的应用。

关键词: 富勒烯; 钙钛矿太阳能电池; 电子传输层; 添加剂; 杂化材料

参考文献

- [1] S. F. Yang, T. Wei, F. Jin, *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 5005-5058.
- [2] S. F. Yang, I. N. Ioffe, S. I. Troyanov, *Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 1783-1792.
- [3] R. N. Guan, M. Q. Chen, F. Jin, S. F. Yang, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 1048-1073.
- [4] L. B. Jia, M. Q. Chen, S. F. Yang, *Mater. Chem. Front.* **2020**, *4*, 2256-2282.
- [5] M. Q. Chen, R. N. Guan, S. F. Yang, *Adv. Sci.* **2019**, *6*, 1800941.
- [6] R. N. Guan, Z.-C. Chen, J. Huang, H.-R. Tian, J. P. Xin, S.-W. Ying, M. Q. Chen, Q. Y. Zhang, Q. X. Li, S.-Y. Xie, L.-S. Zheng, S. F. Yang, *PNAS (Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.)* **2022**, *119*, e2202563119.
- [7] W. H. Xiang, X. L. Jiang, Y.-R. Yao, J. P. Xin, H. M. Jin, R. N. Guan, Q. Y. Zhang, M. Q. Chen, S.-Y. Xie, A. A. Popov, S. F. Yang, *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 21587-21595.
- [8] Y. J. Liu, M. Q. Chen, S. F. Yang, *InfoMat.* **2021**, *3*, 231-251.

Stability of A-D-A non-fullerene acceptors: Molecular insight into the photoisomerization of the dihedral angles

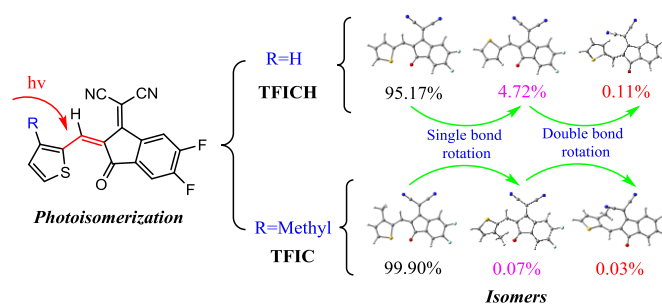
Suyu Yang (杨苏玉)^{1,2}, Yuanping Yi^{1,2*}

¹ Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, CAS Key Laboratory of Organic Solids, Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China.

² University of Chinese Academy Sciences, Beijing 100049, China.

*E-mail: ypyi@iccas.ac.cn

Photostability is pretty important for the A-D-A NFAs application, especially photoisomerization is an important cause of photodegradation. Herein, we explored the mechanism of the photoisomerization through DFT and TD-DFT calculations, and we found that the single bond in the dihedral angle can rotate normally on the ground state, the double bond can only rotate under illumination. There is an intermediate IM with twisted molecule structure that control the photoisomerization, the molecules with sidechain can prevent photoisomerization by reducing the conformational percentage of isomers and accelerating the internal conversion rate constant to maintain the molecular stability, thereby limiting the generation of ES. After photoisomerization, only ES conformation with no sidechain can return to IM when heated, the three isomers can achieve to a balance, while the proportion of IM and ES conformations with sidechains is always keeping a low proportion.



Keywords: A-D-A NFAs; Isomers; DFT and TD-DFT; TS; Photoisomerization

References

- [1] Liu, Z. X.; Yu, Z. P.; Shen, Z.; He, C.; Lau, T. K.; Chen, Z.; Zhu, H.; Lu, X.; Xie, Z.; Chen, H.; Li, C. Z., Molecular insights of exceptionally photostable electron acceptors for organic photovoltaics. *Nat Commun* **2021**, *12* (1), 3049.
- [2] Yu, Z. P.; Liu, Z. X.; Chen, F. X.; Qin, R.; Lau, T. K.; Yin, J. L.; Kong, X.; Lu, X.; Shi, M.; Li, C. Z.; Chen, H., Simple non-fused electron acceptors for efficient and stable organic solar cells. *Nat Commun* **2019**, *10* (1), 2152.

X 射线激发分子的光物理机制、激发态调控及其在多（高）能谱 X 射线成像中的应用探索

杨旻^{1,*}, 马文博¹, 苏一榕¹, 刘旭¹

¹浙江大学光电科学与工程学院, 极端光学技术与仪器全国重点实验室, 杭州市西湖区浙大路 38 号, 310027

*Email: yangyang15@zju.edu.cn

X射线光子与可见光子在激发物质分子时的光物理机制到底有何异同? 我们发现X射线激发分子时会产生大量三线态暗激子, 这和紫外可见光子的激发机制完全不同(只直接激发单线态), 和电子激发(三线态和单线态生成比例为3)的过程更为相似。我们还给出了定量测量X射线激发下单三线态生成比例的计算模型, 和基于稳态和瞬态X射线荧光光谱的两类测量方法。在这一物理图像下, 我们受有机发光二极管中三线态调控方法的启发, 提出了利用热活化延迟荧光机制既高效又高速地利用X光激发下的三线态暗激子, 为高效、高速X射线成像提供了新的科学基础。最后, 我们提出了一种基于叠层闪烁体的多(高)能谱X射线探测和成像的新方法, 这些原子序数较低的分子闪烁体在这一应用中具有独特的应用潜力。

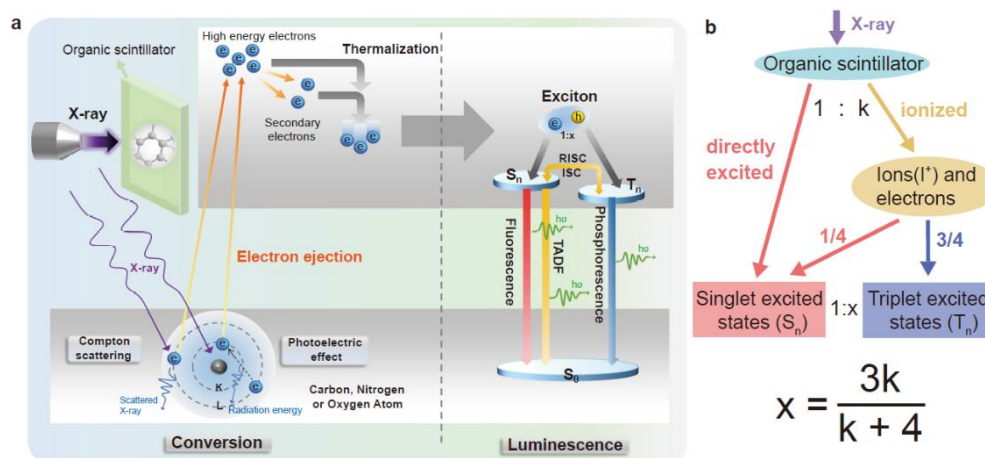


Fig. 1 (a) The physical picture of X-ray interacting with organic molecules, (b) the generation ratio between triplet and singlet states under X-rays.

关键词: X射线成像; 三线态; 热活化延迟荧光; 多能谱X射线探测

参考文献

- [1] Ma, W., Su, Y., Zhang, Q., Deng, C., Pasquali, L., Zhu, W., ... & Yang, Y.* Thermally activated delayed fluorescence (TADF) organic molecules for efficient X-ray scintillation and imaging. *Nature Materials*, 21(2), 210-216. (2021).
- [2] Ran, P., Yang, L., Jiang, T., Xu, X., Hui, J., Su, Y., ... & Yang, Y.* Multispectral Large - Panel X - ray Imaging Enabled by Stacked Metal Halide Scintillators. *Advanced Materials*, 34(42), 2205458. (2022).

High mobility and high luminescence single crystal materials and devices

ZhaoYang (杨昭)¹, Yunlong Guo^{1,*}, Yunqi Liu^{1,*}

¹Institut of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, 2 Zhongguancun North 1st Street, Haidian District, Beijing, 100190

*Email: guoyunlong@iccas.ac.cn;liuyunqi@iccas.ac.cn

Miniaturization, high integration, and functional diversity are the challenges and goals of optoelectronic integrated devices, particularly organic light-emitting transistors (OLETs), one of the smallest organic optoelectronic integrated devices, which have been initially developed in recent years. OLETs combine the current amplification function of organic field-effect transistors (OFETs) with the electroluminescence properties of organic light-emitting diodes (OLEDs). The unique operating mechanism of OLETs makes them widely recognized as one of the ideal key components for the development of next-generation transformative display technologies and the realization of organic electrically pumped lasers. In particular, the electroluminescence of unencapsulated OLETs can be directly observed in real time, which provides an ideal platform for gaining insight into the device physics of charge injection, charge transport, and carrier recombination.^[1]

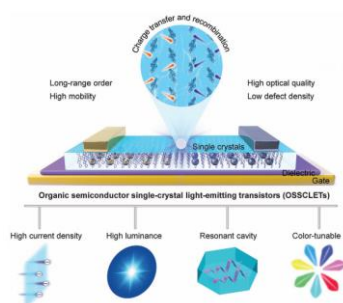


Fig. 1 Schematic of a representative device structure (bottom-gate/top-contact configuration), working principles, and advantages of OSSCLET devices

Keywords: OLETs, high-mobility, high-performance

Reference

[1]Qin, Z. S., C. Gao, H. L. Dong and W. P. Hu "Organic Semiconductor Single-Crystal Light-Emitting Transistors." *Advanced Optical Materials*: 16.

分子静电势及高效率有机光伏材料设计

姚惠峰*

中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号 100190

*Email: yaohf@iccas.ac.cn

有机光伏电池是一种新型能源技术, 具有轻质、柔性、低成本等优势。近年来, 该领域取得了快速的发展, 光电转化效率已经突破19%, 展示了广阔应用前景。机理研究和新材料设计对推动效率提高具有至关重要的作用。在我们工作中, 我们从分子层面出发, 研究了有机光伏材料的分子静电势, 探索了其电荷生成过程及共混形貌的影响, 结果表明分子间静电场作用有助于促进电荷转移, 在低能量损失下取得高效率, 相关结果对进一步设计低能量损失的高效有机光伏材料具有一定的借鉴意义。

关键词: 有机光伏电池; 分子静电势; 形貌; 材料设计;

参考文献

- [1] H. Yao, Y. Cui, D. Qian, C. S. Ponseca, A. Honarfar, Y. Xu, J. Xin, Z. Chen, L. Hong, B. Gao, R. Yu, Y. Zu, W. Ma, P. Chabera, T. Pullerits, A. Yartsev, F. Gao, J. Hou, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, **141**, 7743.
- [2] H. Yao, D. Qian, H. Zhang, Y. Qin, B. Xu, Y. Cui, R. Yu, F. Gao, J. Hou, *Chin. J. Chem.* **2018**, **36**, 491
- [3] Ma L, Yao H, Wang J, Xu Y, Gao M, Zu Y, Cui Y, Zhang S, Ye L, Hou J. *Angew. Chem. Inter. Ed.* **2021**, **60**, 15988-15994.

聚合物光伏共混体系的薄膜微结构与力学性能研究

叶龙^{1,2*}, 彭忠祥¹, 周康康¹

¹ 天津大学, 天津市津南区, 300350

² 天津市分子光电科学重点实验室

*Email: yelong@tju.edu.cn

三元有机太阳能电池的能量转换效率得到大幅提升, 有望实现商业化应用^[1]。然而, 领域内对于三元共混体系微观结构和(光伏/力学)性能关系的研究仍然缺乏基本认识。最近, 我们通过同步辐射散射和纳米力学定量分析方法较为全面地研究了第三组分对聚合物:小分子共混体系(PM6:N3)中分子堆积、相分离结构、力学性能和光伏性能的影响^[2]。结果表明, 在PM6:N3二元体系中加入少量的热塑性弹性体(如SEBS)^[3]可以同时实现最优的器件性能和最佳的延展性, 这主要归因于有序分子堆积及取向和优化的相分离结构。此外, 共混体系的弹性模量随着第三组分含量的增加而减小, 可以通过力学模型来预测。这种策略简单、有效, 可以为理解和调控多相多组分有机光伏薄膜的光伏性能以及力学性能提供参考。

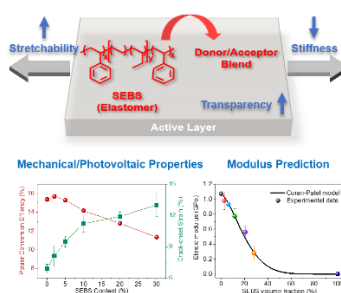


Fig. 1 Impact of thermoplastic elastomer on the performance of PM6:N3 blend films.

关键词: 有机光伏电池; 热塑性弹性体; 力学性能; 薄膜微结构

参考文献

- [1] Ma R., Zhou K., Sun Y., Liu T., Kan Y., Xiao Y., Dela Peña T.A., Li Y., Zou X., Xing Z., Luo Z., Wong K.S., Lu X., Ye L., Yan H., Gao K. *Matter* **2022**, *5*: 725.
- [2] Peng Z., Jiang K., Qin Y., Li M., Balar N., O'Connor B.T., Ade H., Ye L., Geng Y. *Adv. Energy Mater.* **2021**, *11*: 2003506.
- [3] Peng Z., Xian K., Cui Y., Qi Q., Liu J., Xu Y., Chai Y., Yang C., Hou J., Geng Y., Ye L. *Adv. Mater.* **2021**, *33*: 2106732.

分子组装构筑响应型光功能材料

易涛*, 张灯青, 吴宏伟, 魏鹏

东华大学, 化学与化工学院, 上海市松江区, 邮编 210620

*Email: yitao@dhu.edu.cn

光功能材料在光电转化、光催化、智能材料、防伪和生物检测等方面具有重要的应用价值。小分子发光材料由于其分子转动和振动的特点, 在溶液和固态的光学性质往往有较大区别。为了构筑在溶液态和固态都具有高荧光量子产率的荧光/室温磷光体系, 我们通过调控分子的空间构型和自组装结构, 从而调控其振动能级和固态荧光/磷光性质, 获得了具有多态发光、室温长寿命发光和刺激响应发光性质^[3]的光功能材料, 并将其应用于防伪和细胞成像。^[1-2]进一步利用配位键导向自组装方法构筑了具有聚集诱导发光特性的铂(II)大环化合物, 通过自组装发展了具有连续能量转移过程的光捕获体系, 成功应用于水体系中的光催化反应^[3]。我们还利用金属有机框架联合共价有机框架的合成策略, 在溶液和细胞中实现光催化过氧化氢分解产生氧气, 并将其转化为单线态氧的双重催化功能, 激活细胞的光动力过程^[4]。

关键词: 光功能; 响应; 分子组装 (五号宋体, 关键词个数不超过5个)

参考文献

- [1] Li, Y.; Baryshnikov, G. V.; Siddique, F.; Wei, P.; Wu, H.; Yi, T. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, **61**: e202213051.
- [2] Wang, W.; Li, R.; Xiao, S.; Xing, Q.; Yan, X.; Zhang, J.; Zhang, X.; Lan, H.; Yi, T. *CCS Chem.* **2021**, **3**: 1587 - 1597
- [3] Zhang, D.; Yu, W.; Li, S.; Xia, Y.; Li, X.; Li, Y.; Yi, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143**: 1313-1317
- [4] Li, X.; Wang, J.; Xue, F.; Wu, Y.; Xu, H.; Yi, T.; Li, Q. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 2534 - 2540

高效有机光伏电池电子过程的理论研究

易院平 ^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市中关村北一街2号, 100190

*Email: ypyi@iccas.ac.cn

为实现光-电转换, 有机光伏电池需要依次经历光吸收形成激子、激子扩散、激子分离产生电荷、电荷迁移、以及电荷收集等一系列电子过程, 同时存在激子衰减和电荷复合等导致能量损失的过程。本报告将重点探讨高效非富勒烯有机光伏电池中电荷产生、电荷迁移和电荷复合过程, 阐述极化效应、超交换耦合机制、以及三线态参与的重要影响和调控作用, 为进一步提高有机光伏效率尝试给出新的见解和思路。

关键词: 光电转换; 有机光伏; 理论模拟

参考文献

- [1] Han, G.; Yi, Y. *Acc. Chem. Res.* **2022**, **55** (6): 869.
- [2] Han, G.; Yi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61** (49): e202213953.
- [3] Guo, Y.; Han, G.; Yi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, **61** (30): e202205975.
- [4] Zhu, L.; Zhang, J.; Guo, Y.; Yang, C.; Yi, Y.; Wei, Z. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60** (28): 15348.
- [5] Han, G.; Hu, T.; Yi, Y. *Adv. Mater.* **2020**, **32** (22): 2000975.
- [6] Tu, Z.; Han, G.; Yi, Y. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, **11** (7): 2585.

高性能钙钛矿半导体太阳能电池及发光二极管

游经碧*

中国科学院半导体研究所，北京市海淀区清华东路甲 35 号，100083

*Email: jyou@semi.ac.cn

金属卤化物钙钛矿作为一类新型半导体光电材料，既具有无机半导体优异光电性能，又具备有机半导体可溶液法制备的优点，是当前半导体光电器件领域的研究前沿。近年来，钙钛矿光电器件转换效率取得了巨大的进展，钙钛矿电池光电转换效率已达到 25.7%，可与传统电池媲美；基于钙钛矿的发光二极管的绿光、红光外量子效率已超过 25%，并保持迅猛发展态势。本报告将介绍我们在钙钛矿电池和发光二极管两方面的研究工作，1) 通过二次相稳定钙钛矿，实现了 25.6% 钙钛矿太阳能电池；2) 通过表面重构的方法，实现了长载流子寿命的全无机钙钛矿，达到 21% 光电转换效率；3) 利用掺杂空穴注入层，实现高效蓝光钙钛矿发光二极管。

关键词：钙钛矿；太阳能电池；发光二极管

参考文献

- [1] Zhang, Y. et al. *Science*, **2022**, 377, 531.
- [2] Chu, X. et al., *Nature Energy*, 2023. doi.org/10.1038/s41560-023-01220-z.
- [3] Chu, Z. et al., *Nature Electronics*, 2023, In Press.

高迁移率聚合物半导体材料与器件

于贵*

中国科学院化学研究所, 北京, 100190

*Email: yugui@iccas.ac.cn

聚合物半导体已引起研究者的广泛关注, 被用于制备有机光电器件和有机自旋器件。发展高迁移率的新型共轭聚合物和拓展共轭聚合物的种类是该领域研究的首要任务, 为此我们发展了新型的二芳基乙烯的给体单元和氮杂异靛青衍生物的受体单元, 设计、合成了系列高迁移率的DPP类聚合物、萘酰亚胺类聚合物和异靛青类聚合物, 通过聚合物主链上引入杂原子、氟原子、氰基和三氟甲基来调控其主链的共平面性、能级结构和薄膜中的聚集态结构, 进而改善载流子的传输类型和传输性能。同时, 我们首次提出了有限共轭聚合物概念, 发展了柔性可拉伸聚合物, 其电子迁移率为 $7.25 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。最近, 我们采用双异靛青受体策略, 获得了电子迁移率超过 $16 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的共轭聚合物。

关键词: 共轭聚合物; 半导体材料; 场效应晶体管; 迁移率

参考文献

- [1] Shi, K. L.; Zhang, W. F.; Gao, D.; Zhang, S. Y.; Lin, Z. Z.; Zhou, Y. K.; Wang, L. P.; Yu, G. *Adv. Mater.* **2018**, *30*: 1705286.
- [2] Zhang, W.F.; Shi, K. L.; Lai, J.; Zhou, Y. K.; Wei, X. Y.; Che, Q.; Wei, J. B.; Wang, L. P.; Yu, G. *Adv. Mater.* **2023**, DOI: 10.1002/adma.202300145.
- [3] Wei, C.; Zhang, W.; Huang, J.; Li, H.; Zhou, Y.; Yu, G. *Macromolecules* **2019**, *52*: 2911.
- [4] Huang J.; Chen, Z.; Yang, J.; Ju, H.; Zhang, W.; Yu, G. *Chem. Mater.* **2019**, *31*: 2507.
- [5] Chen, Z.; Zhang, W.; Zhou, Y.; Wei, X.; Li, C.; Wang, L.; Yu, G. *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*: 9055.
- [6] Chen, Z.; Zhang, W.; Wei, C.; Zhou, Y.; Pan, Y.; Wei, X.; Huang, J.; Wang, L.; Yu, G. *Chem. Mater.* **2020**, *32*: 2330.

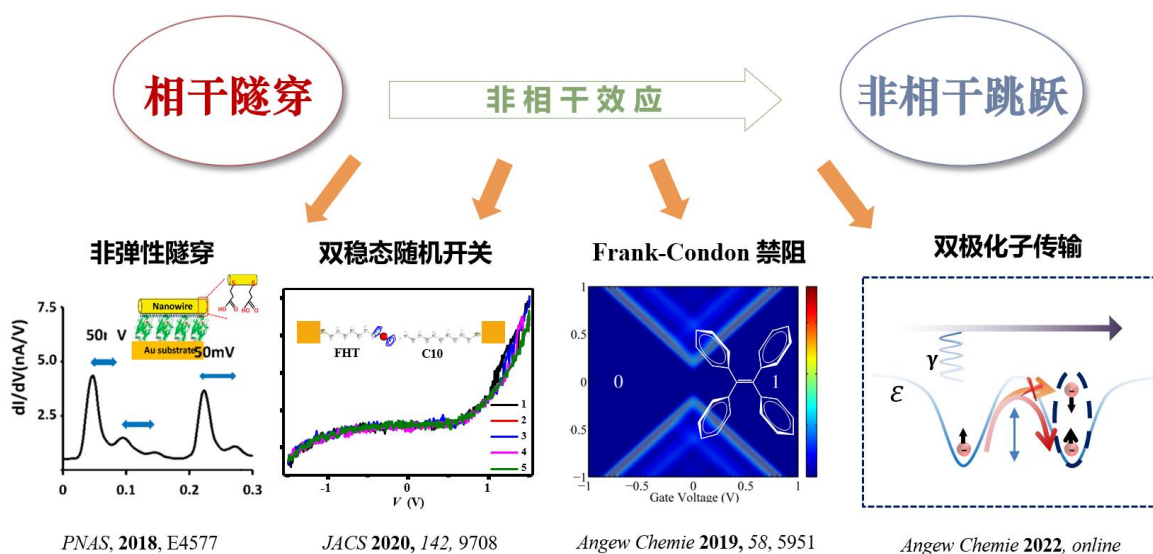
分子尺度的非相干电荷传递与分子器件

于曦*

天津大学理学院，天津市南开区卫津路 92 号，300072

*Email: xi.yu@tju.edu.cn

电荷的传递是化学世界中最基本的微观运动，是分子体系中能量、物质转换与信息传递的基元过程，因而研究跨越分子电荷传递的机理与动力学是物质科学基础科学问题，也是化学、物理、微电子与信息等学科的共性科学问题。本报告将介绍我们近些年在分子尺度的非相干电荷传输方面的研究进展，沿着电荷传输机理相空间的不同维度探索了一系列丰富多样的非相干电荷输运过程，发展了非相干效应的电流谱学，揭示了非相干传输中电极与分子结构的重要角色，实现了非相干效应的设计与控制，发现了非相干输运下的多电子效应与自旋磁阻效应，以及利用非稳态电荷传递构筑神经形态器件。这一系列研究突破传统理论框架，丰富了人们对于分子尺度电荷传递的基本认识，同时跨越学科语言壁垒，揭示了电荷传递的不同学科表象在底层规则的统一，并为未来的新型微尺度器件提供了基础。



关键词：电荷传递；非相干传输；分子器件

参考文献

- [1] Fereiro, J. A.; Yu, X.*; and Cahen, D* et al. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2018**, *115*, E4577.
- [2] Tian, G* and Yu, X.* et al *Angew. Chemie - Int. Ed.* **2019**, *58*, 5951.
- [3] Han, B., Yu, X.* and Hu, W.* et al *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 9708.
- [4] Ding, S.* and Yu, X.* et al *Angew. Chemie Int. Ed.* **2022**, *61* (44), 1-6.

具有形状记忆功能的光致形变液晶高分子

俞燕蕾*, 王金雷, 黄鑫, 张潇

复旦大学材料科学系, 上海市邯郸路 220 号, 200433

*Email: ylyu@fudan.edu.cn

偶氮苯液晶高分子在紫外光照射下会产生偶氮苯基团的光致顺反异构, 促使液晶基元的取向发生变化, 这种有序排列的改变进一步引起整个高分子网络产生各向异性的宏观形变^[1]。由于光刺激具有远程局部精确操控的特点, 并且可以通过改变波长、强度、偏振方向等多种参数进行调控, 因此, 光致形变液晶高分子在无线软体执行器的制备中具有独到的优势。目前, 基于光致形变液晶高分子构筑的软体执行器已经具有抓取、爬行、跳跃等功能, 但大部分以一维纤维和二维薄膜为主要形式^[2]。制备其三维执行器则需要借助激光直写、3D打印等专业化的精细设备^[3]。

近年来, 我们提出了一种利用形状记忆效应构筑液晶高分子三维执行器的新策略。然而, 热致形状记忆效应所需升高的温度往往会超过液晶高分子的相转变温度, 破坏液晶的有序结构, 导致其失去通过液晶基元排列变化而发生光致形变的执行能力。因此, 我们率先建立了一种实现无热光致形状记忆效应的全新机制(图1): 以偶氮苯基元作为形状记忆效应的转变单元, 可以在不改变体系温度的情况下, 通过其光致异构化来光控调节高分子本身的玻璃化转变温度(T_g), 使材料体系中储存的熵能得以释放, 材料可以回复到永久形状, 从而实现无热形状记忆^[4]。结合光刺激源可远程、定点、精确控制的优点, 还实现了形状回复的局部控制。在此基础上, 我们提出了一种先塑形再取向的策略: 首先借助光致形状记忆效应精准调控形状的回复程度, 实现光控塑形并构筑出三维结构器件; 再通过退火自组装, 使得此三维结构器件中形成液晶有序结构, 从而实现光致形变。



图 1. 偶氮苯液晶高分子网络的无热形状记忆效应过程与机理

关键词: 液晶高分子; 光致形变; 形状记忆; 偶氮苯

参考文献

- [1] 卿鑫, 吕久安, 俞燕蕾. 高分子学报, **2017**, **11**:1679.
- [2] Qin, L.; Liu, X. J.; Yu, Y. L. *Adv. Optical Mater.* **2021**, **9**: 2001743.
- [3] Zhu, C. Y.; Lu, Y.; Jiang, L. X.; Yu, Y. L. *Adv. Funct. Mater.* **2021**, **31**: 2009835.
- [4] Zhang, X.; Zhu, C. Y.; Xu, B.; Qin, L.; Wei, J.; Yu, Y. L. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, **11**: 46212.

准梯型聚合物发光场效应晶体管

袁达飞^{1*}¹湖南大学, 长沙市麓山南路2号, 410082

*Email: yuandafei14@hnu.edu.cn

通过分子设计, 将高载流子迁移率和高荧光量子产率结合到单个分子, 同时实现光信号和电信号的输出, 有望应用于新型有机电子器件如有机发光场效应晶体管和有机电泵浦激光。然而, 同时集成高载流子迁移率和高荧光量子产率一直是有机电子学领域的重大挑战。报告人最新研究表明精确的聚合物链间 π - π 堆积 (4.0 Å)、更低的能量无序度、增强的结晶性、 J -聚集以及平面共轭骨架, 是准梯型聚合物TPTQ-F同时获得高效迁移率 ($>10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) 和高荧光量子产率 (77%) 的关键因素。这一系列工作凝练和总结了同时实现高电荷迁移率和强荧光发射的材料设计思路, 为多重功能输出的光电材料的设计、以及先进电子器件的发展提供明确的指引和材料基础。

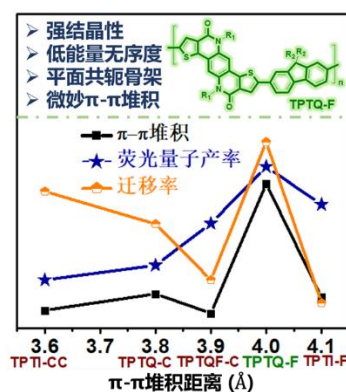


Figure 1 Design strategy toward high-performance OLET materials.

关键词: 发光场效应晶体管; 迁移率; 荧光量子产率

参考文献

- [1] Yuan, D.; Awais, M. A.; Sharapov, V.; Liu, X.; Neshchadin, A.; Chen, W.; Yu, L. Synergy between Photoluminescence and Charge Transport Achieved by Finely Tuning Polymeric Backbones for Efficient Light-Emitting Transistor. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 5239-5246.
- [2] Yuan, D.; Awais, M. A.; Sharapov, V.; Liu, X.; Neshchadin, A.; Chen, W.; Bera, M.; Yu, L., Foldable Semi-Ladder Polymers: Novel Aggregation Behavior and High-Performance Solution-Processed Organic Light-Emitting Transistors. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 11315.
- [3] Yuan, D.; Awais, M. A.; Sharapov, V.; Liu, X.; Neshchadin, A.; Chen, W.; Yu, L., Highly Emissive Semi-Ladder-Type Copolymers, Aggregation State and Solution-Processed Organic Light-Emitting Transistor. *Chem. Mater.* **2020**, *32*, 4672.
- [4] Yuan, D.; Sharapov, V.; Liu, X.; Yu, L., Design of High-Performance Organic Light-Emitting Transistors. *ACS Omega* **2020**, *5*, 68-74.

有机-纳米晶杂化太阳能电池

袁建宇^{1*}

¹苏州大学 功能纳米与软物质研究院, 苏州市工业园区仁爱路 199 号, 215123

*Email: jyuan@suda.edu.cn

近年来, 新型CsPbX₃钙钛矿纳米晶材料受到了广泛关注, 为发展新型光电器件提供新的材料选择。我们团队在国际上率先开展了基于CsPbI₃纳米晶太阳能电池的研究, 利用有机共轭功能材料辅助表面调控策略, 多次取得光电转换效率记录。最近两年的主要研究成果包括: (1)首次报道了功能有机分子L-苯丙氨酸高效原位“双螯合钝化”的新策略, 实现了14.6%的最高效率和胶体稳定性(>1个月); (2) 提出了有机二丙胺和极性溶剂协同作用辅助表面配体交换工艺, 发展了一系列基于有机硫氰酸胍、巯基吡啶等后钝化工艺, 减少表面缺陷同时提升材料稳定性, 报道了超过16%的电池效率; (3) 构筑基于有机/纳米晶异质结的杂化器件结构, 突破了电荷分离效率低, 制备工艺繁琐等关键限制, 取得柔性纳米晶光伏器件的最高报道效率12.3%。我们从通过有机功能材料材料, 实现纳米晶表面调控以及新型器件结构构筑, 有针对性地为制备高效率纳米晶太阳能电池提供了有效的实验路径, 为本领域发展高效太阳能电池提供了新的材料选择和器件设计思路。

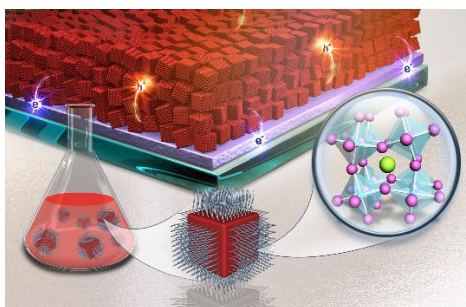


Fig. 1 Organic-nanocrystal hybrid solar cells

关键词: 有机半导体; 无机纳米晶; 太阳能电池

参考文献

- [1] Huang, H.; Ma, W.; Yuan, J. * et al., *Adv. Funct. Mater.* 2023, 33, 2210728.
- [2] Zhang, X.; Yuan, J.* et al., *Adv. Mater.* 2022, 32, 2105977.
- [3] L. Hu, J. Yuan*, et al., *Nat. Commun.* 2021, 12, 446.
- [4] Shi, J.; Yuan, J.*, Ma, W.* et al. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 22230.
- [5] Wang, Y.; Yuan, J.*; Ma, W.* et al. *Adv. Mater.* 2020, 32, 2000449.

非典型发光化合物及其发光调节

袁望章

上海交通大学化学化工学院, 上海市闵行区东川路 800 号, 200240

*Email: wzhyuan@sjtu.edu.cn

近年来, 不含芳(杂)环或重复单键-重键等大共轭单元的非典型发光化合物引起了人们的广泛关注。其通常仅含N、O、S、P等杂原子, C=O、C=C、CN、S=O等富电子单元, 以及不同基团的组合单元等, 具有原料易得、合成简便、生物相容性好等优势。目前, 其机理仍未形成广泛共识。在发现大米、纤维素、淀粉等天然产物发光的基础上, 我们提出了簇聚诱导发光(CTE)机理, 即富电子单元的簇聚、电子离域扩展与构象刚硬化来阐释发光现象。系统研究了天然产物、生物分子、合成化合物及超分子体系, 揭示了其共同的光物理特性, 如浓度增强发光、聚集诱导发光、激发波长依赖性发射等, 建立了不同体系的关联。本论文将从机理、光物理性质及其调节等阐述我们近年来在非典型发光化合物领域的研究进展。

关键词: 非典型发光化合物; 簇聚诱导发光; 聚集诱导发光; 磷光

参考文献

- [1] Gong, Y.; Tan, Y.; Mei, J.; Zhang, Y.; Yuan, W.; Zhang, Y.; Sun, J.; Tang, B. *Z. Sci. China Chem.* **2013**, **56**: 1178.
- [2] Zhou, Q.; Cao, B.; Zhu, C.; Xu, S.; Gong, Y.; Yuan, W. Z.; Zhang, Y. *Small* **2016**, **12**: 6586.
- [3] Tang, S.; Yang, T.; Zhao, Z.; Zhu, T.; Zhang, Q.; Hou, W.; Yuan, W. Z. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, **50**: 12616.
- [4] 陈晓红, 王允中, 张永明, 袁望章. 化学进展, **2019**, **31**: 1560.

有机电化学晶体管材料与器件

段傢耀¹, 朱根明¹, 陈俊鑫¹, 刘日平¹, 朱修远¹, 陈超越¹,

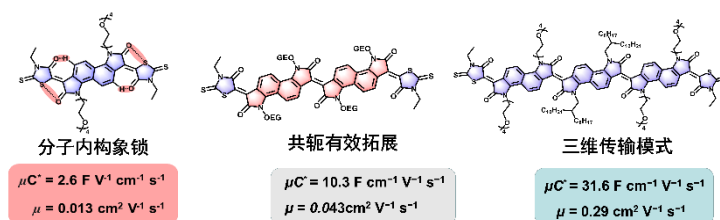
李正珂¹, 岳晚^{1*}

¹ 中山大学, 广东省广州市番禺区大学城中山大学化学材料楼 C1036, 邮编 510006

*Email: yuew5@mail.sysu.edu.cn

有机电化学晶体管 (OECT) 具有结构简单、工作电压超低 (<1V)、高跨导以及良好的生物相容性等优势, 在生物传感、疾病诊断、神经形态计算等领域显示出广阔的应用前景。就 OECT 的沟道材料而言, 小分子半导体材料在 n 型 OECT 中的结构多样性和性能远远落后于聚合物材料, 然而小分子半导体材料具有结构明确、无批次间差异, 更加精准的构效关系等诸多特点。如何结合聚合物和小分子的优点以提高其性能参数 μC^* 是目前 OECT 发展面临的问题之一。

n 型小分子电化学材料性能低的本质原因之一为离子-电子耦合模式中的电子迁移率低。通过引入分子内 S-O 非键相互作用“构象锁”, 全受体的共轭拓展稠环策略实现了电子迁移率两个量级的提升 (和酰亚胺体系相比)。^[1,2] 提出使用氟醇溶剂溶液法加工, 由于镀膜过程中氟醇诱导薄膜微结构自组装更利于混合离子传输, 显著提升器件性能及操作稳定性, 建立起准确的分子结构-性能的关系。^[3] 提出全受体稠合低聚物分子策略调控混合离子-电子传输, 斜向的三维离子-电子混合传输模式再次提升有机电化学器件的电子迁移率和器件性能, 再次刷新基于小分子/低聚物的有机电化学晶体管器件性能的记录。^[4]



高性能 n 型小分子有机电化学材料 全受体稠合策略实现性能逐步提升

关键词: 有机电化学晶体管; 离子-电子传输; 有机功能分子, 生物电子器件

参考文献

- [1] Jiayao Duan; Genming Zhu; Lewen Wang; Junxin Chen; Shengyu Cong; Xiuyuan Zhu; Yecheng Zhou; Zhengke Li; Iain McCulloch; Wan Yue* ; *Adv. Funct. Mater.* **2022**, 32, 2203937.
- [2] Jiayao Duan+, Genming Zhu+, Liuyuan Lan,* Junxin Chen, Xiuyuan Zhu, Chaoyue Chen, Yaping Yu, Hailiang Liao, Zhengke Li, Iain McCulloch, and Wan Yue*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, e202213737.VIP.
- [3] Genming Zhu,# Junxin Chen,# Jiayao Duan,# Hailiang Liao, Xiuyuan Zhu, Zhengke Li, Iain McCulloch, and Wan Yue*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**,14, 43586.
- [4] Jiayao Duan; Genming Zhu; Junxin Chen; Chenyang Zhang; Xiuyuan Zhu; Hailiang Liao; Zhengke Li; Hanlin Hu; Iain McCulloch; Christian B. Nielsen*; Wan Yue*; *Adv. Mater.* **2023**, doi:10.1002/adma.202300252.

共轲单分子电荷输运性质调控研究

臧亚萍^{1*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 100190

*Email: zangyaping@iccas.ac.cn

单分子电荷输运性质研究不但能够揭示电荷输运的微观机制, 也为在分子层面进行本征及新物性研究提供重要手段。针对纳米尺度精确调控单分子电荷输运这一关键问题, 我们首先设计发展了基于四硫富瓦烯(TTF)锚定基团的新型强耦合电极-分子界面, 并因此制备了具有优异电荷输运性质的共轲分子导线以及机械力调控的高性能分子开关^[1]。此外, 我们基于具有径向离域 π 轨道的环对苯撑CPP分子, 制备了一系列环形共轲单分子器件^[2]。我们发现, 相比于常规的线性联苯分子, 环形CPP分子体系的短距离电荷传输效率得到显著提高, 同时利用CPP环内张力变化可以实现对分子电导的高效调控。这一结果首次在分子尺度揭示了环形弯曲共轲分子独特的电荷输运性质, 不但为发展新型分子器件提供思路, 也对设计新的碳纳米材料具有重要的意义。

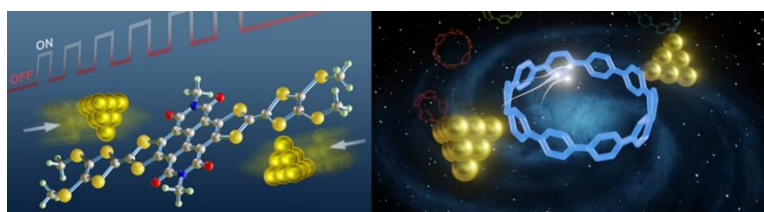


Fig. 1 Single molecule junctions of NDITTF and CPP

关键词: 单分子器件; 电荷输运; 共轲分子; STM-BJ

参考文献

- [1] Zhou Q.[#]; Song K.[#]; Zhang, G.*; Song X.; Lin J.; Zang Y.*; Zhang D.; Zhu D. *Nat. Commun.* **In press.**
[2] Lv Y.[#]; Lin J.[#]; Song K.; Song X.; Zang H.*; Zang Y.*; Zhu D.* *Sci. Adv.* **2021. 7:** eabk3095.

稠环电子受体光伏材料

占肖卫*

北京大学材料学院, 北京, 100871

*Email: xwzhan@pku.edu.cn

富勒烯衍生物占据有机光伏受体材料的统治地位长达20余年。然而, 富勒烯在可见光区吸收弱, 能量损失大, 器件效率受限; 富勒烯球形分子易聚集, 形貌稳定性差, 器件寿命受限。2006年之前, 非富勒烯器件效率很低, 且长期停滞不前。整个领域因为受体制约遭遇发展瓶颈, 创制高性能的新型受体材料是亟待解决的挑战性难题。本团队于2006年率先在国内开展了新型非富勒烯受体的研究, 经过十余年的探索, 创制了被誉为“里程碑”的“明星分子”ITIC, 开创了“稠环电子受体”这一高性能新颖受体体系。稠环电子受体颠覆了富勒烯经典体系, 开启了领域的“非富勒烯时代”, 突破了有机光伏的瓶颈, 器件效率实现飞跃。稠环电子受体已成为中国原创和引领、多国竞相跟进的新领域。20余个国家300余个研究组在诸多领域使用稠环电子受体, 如: 有机太阳能电池、钙钛矿太阳能电池、量子点太阳能电池、光解水、场效应晶体管、光电探测器、光热/光声/光动力治疗、双光子吸收等。

关键词: 有机光伏; 非富勒烯受体; 稠环电子受体

参考文献

1. Y. Lin, J. Wang, Z. Zhang, H. Bai, Y. Li, D. Zhu, X. Zhan, *Adv. Mater.* **2015**, *27*, 1170.
2. Y. Lin, Q. He, F. Zhao, L. Huo, J. Mai, X. Lu, C. Su, T. Li, J. Wang, J. Zhu, Y. Sun, C. Wang, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 2973.
3. Y. Lin, F. Zhao, Q. He, L. Huo, Y. Wu, T. Parker, W. Ma, Y. Sun, C. Wang, D. Zhu, A. Heeger, S. Marder, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 4955.
4. S. Dai, F. Zhao, Q. Zhang, T.-Z. Lau, T. Li, K. Liu, Q. Ling, C. Wang, X. Lu, W. You, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 1336.
5. J. Wang, J. Zhang, Y. Xiao, T. Xiao, R. Zhu, C. Yan, Y. Fu, G. Lu, X. Lu, S. R. Marder, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 9140.
6. M. Zhang, S. Dai, S. Chandrabose, K. Chen, K. Liu, M. Qin, X. Lu, J.M. Hodgkiss, H. Zhou, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 14938.
7. C. Yan, S. Barlow, Z. Wang, H. Yan, A. K.-Y. Jen, S. R. Marder, X. Zhan, *Nat. Rev. Mater.* **2018**, *3*, 18003.
8. B. Jia, J. Wang, Y. Wu, M. Zhang, Y. Jiang, Z. Tang, T. P. Russell, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 19023.
9. T. Li, Y. Wu, J. Zhou, M. Li, J. Wu, Q. Hu, B. Jia, X. Pan, M. Zhang, Z. Tang, Z. Xie, T. P. Russell, X. Zhan, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20124.
10. J. Wang, X. Zhan, *Acc. Chem. Res.* **2021**, *54*, 132.

Energy Alignment on the Hole-Transport Materials for Perovskite Solar Cells

Bin Zhang (张斌)*

School of Chemistry and Chemical Engineering, Guizhou University,
Guiyang 550025, P. R. China

* Corresponding author: zhangb@gzu.edu.cn

The energy loss (E_{loss}) control via interfacial engineering was significantly an indispensable methodology to realize high-performance all-inorganic perovskite solar cells (PVSCs). Herein, three novel polytriphenylamine-based polymer derivatives (H-Z1, H-Z2 and H-Z3) were synthesized, and the energy levels of these polymers could be tuned feasibly through introducing the electron-withdrawing group of trifluoromethyl in triphenylamine (TPA) unit. These very deep HOMO energy levels would be very beneficial for improving the open-circuit voltages (V_{oc} s) in PVSCs with the potentially decreased E_{loss} . Due to the gradually deepening of HOMO energy levels from H-Z1, H-Z2 to H-Z3, the V_{oc} s were elevated from 1.23, 1.28 to 1.30 V, respectively, where the E_{loss} s were decreased from 0.69, 0.64, to 0.62 eV for H-Z1, H-Z2 and H-Z3, respectively. Interestingly, both of the H-Z1 and H-Z2 based devices showed highest PCEs over 14% in all-inorganic PVSCs, which were effectively comparable to the results of reference device by using Spiro-OMeTAD as HTL. Hence, through the efficient atomic engineering and chemical modification in corresponding p-typed polymers, the excellent hole transport polymers would be achieved for high-performance and stable PVSCs with very low E_{loss} .

有机半导体形貌调控的动力学用于药物释放研究

张博雅, 张凤娇*

中国科学院大学化学科学学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

*Email: fjiaozhang@ucas.ac.cn

共轭聚合物具有可溶液加工、优异的机械柔韧性、良好的生物相容性等诸多优点, 在生物传感^[1]、神经形态计算^[2]和药物释放^[3]等方面有着广泛的应用。在众多应用领域中, 离子迁移具有不可忽视的作用。在共轭聚合物薄膜中, 离子通过跳跃和溶剂化等方式实现传递, 并受到分子堆积、薄膜结晶度以及薄膜的形貌的直接影响。研究表明通过改变聚合物半导体分子结构^[4]、溶液加工技术^[5]、以及界面工程化^[6]可以精准调控分子堆积结构, 为离子传输调控和有机电子器件功能化提供重要策略。在本工作中, 我们以复合有机半导体材料为研究主体, 结合溶液法加工精准调控有机薄膜的微观结构, 以电子器件为研究平台, 系统探究聚合物薄膜形貌对电控离子移动性能的影响, 探究新型离子动力学调控方式, 最终发展有机半导体薄膜调控的药物释放应用研究。

关键词: 形貌; 离子动力学; 药物释放

参考文献

- [1] Guo, K.; Wustoni, S.; Koklu, A.; Díaz-Galicia, E.; Moser, M.; Hama, A.; Alqahtani, A. A.; Ahmad, A. N.; Alhamlan, F. S.; Shuaib, M.; Pain, A.; McCulloch, I.; Arold, S. T.; Grünberg, R.; Inal, S. *Nat Biomed Eng*, **2021**, *5*: 666.
- [2] Ji, X.; Paulsen, B.D.; Chik, G.K.K.; Wu, R.; Yin, Y.; Chan, P.K.L.; Rivnay, J. *Nat Commun*, **2021**, *12*: 2480.
- [3] Isaksson, J.; Kjall, P.; Nilsson, D.; Robinson, N.; Berggren, M.; Richter-Dahlfors A. *Nature Mater*, **2007**, *6*: 673.
- [4] Giovannitti, A.; Sbircea, D.T.; Inal, S.; Nielsen, C.B.; Bandiello, E.; Hanifi, D.A.; Sessolo, M.; Malliaras, G.G.; McCulloch, I.; Rivnay, J. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, **2016**, *113*: 12017.
- [5] Paterson, A. F.; Savva, A.; Wustoni, S.; Tsetseris, L.; Paulsen, B. D.; Faber, H.; Emwas, A. H.; Chen, X.; Nikiforidis, G.; Hidalgo, T. C.; Moser, M.; Maria, I. P.; Rivnay, J.; McCulloch, I.; Anthopoulos, T. D.; Inal, S. *Nat. Commun.*, **2020**, *11*: 3004.
- [6] Zhang, F.; Mohammadi, E.; Luo, X.; Strzalka, J.; Mei, J.; Diao, Y. *Langmuir*, **2018**, *34*(3): 1109.

分子材料磁场效应与自旋调控

张闯^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 光化学重点实验室, 北京, 100190

*Email: zhangc@iccas.ac.cn

材料体系中自旋相关过程使其在外磁场作用下产生各种各样的性质变化和奇特效应。为深入研究以上的磁场效应, 我们搭建了磁场下的电学、光谱、显微成像、原位反应等一系列表征装置。我们依据分子材料抗磁悬浮的基本原理: 开发了磁控组装方法, 借助外磁场可控制备了多种聚合物小球的耦合结构, 表征了其作为特殊形状光学微腔的光物理性质; 发展了磁畴转印技术, 大面积制备分子微晶等各类材料的可变形阵列结构, 展示了其在加密显示方面的应用前景。同时, 我们在基于激基复合物分子体系的发光器件中, 研究了磁场调控的单重态-三重态转化过程, 为解决电注入下三重态累积问题从而提高器件发光效率提供新思路。

关键词: 磁场效应; 自组装; 发光分子材料

参考文献

- [1] Yin, B.; Jia, H.; Chen, R.; Chang, Q.; Feng, J.; Gao, H.; Wu, Y.;* Jiang, L.;* Zhang, C.; *Adv. Mater.* **2022**, **34**: 2108279.
- [2] Yin, B.; Liang, J.; Hao, J.; Dai, C.; Jia, H.; Wang, H.; Wang, D.; Shu, F.-J.; Zhang, C.; *Gu, J.*; *Zhao, Y.S.* *Sci. Adv.* **2022**, **8**: abn8106.
- [3] Zhou, Z.; Chen, R.; Jin, P.; Hao, J.; Wu, W.; Yin, B.;* Zhang, C.; *Yao, J.* *Adv. Funct. Mater.* **2023**, **33**: 2211059.

有机复合材料微纳激光

张春焕^{1*}

¹北京理工大学, 中关村南大街5号, 100081

*Email: zhangchunhuan@bit.edu.cn

激光是20世纪以来人类最重大伟大的发明之一, 已经在军事国防、工业生产和人们日常生活的诸多领域得到了广泛应用, 这些领域涉及能源、信息、生物医学等一系列战略新兴产业。随着科技的进步, 激光技术也不断发展, 其中微纳激光是激光技术与纳米科学交叉产生的研究前沿。在微纳尺度, 激光器三要素(谐振腔、增益介质、泵浦源)同传统激光器相比都有显著的不同^[1]。研究发现, 有机材料在发光效率、柔性、加工性等方面表现出独特的优势。有机分子种类丰富, 结构可设计, 性能可剪裁, 在材料选择方面有很大的灵活性, 同时有机材料一般具有较大的光吸收和光辐射截面, 利用有机材料易掺杂的特性, 可以实现全波段连续可调的受激发射, 解决目前紫外和红外波段激光材料短缺的问题。针对高密度光子学集成对高性能微纳激光提出的新要求, 多种增益材料和微腔结构的复合为高性能的新型微纳激光器的发展提供了更广阔的空间^[2]。有机材料, 尤其是有机高分子材料具有优异的材料兼容性, 以及可控的制备加工性能, 非常适合复合微纳激光器的构筑^[3]。更为重要的是, 有机材料中激发态过程丰富的特性在复合结构中会进一步放大, 进而产生许多新奇的光学性质, 对微纳激光器的性能提升和功能拓展将起到极大的推动作用^[4]。

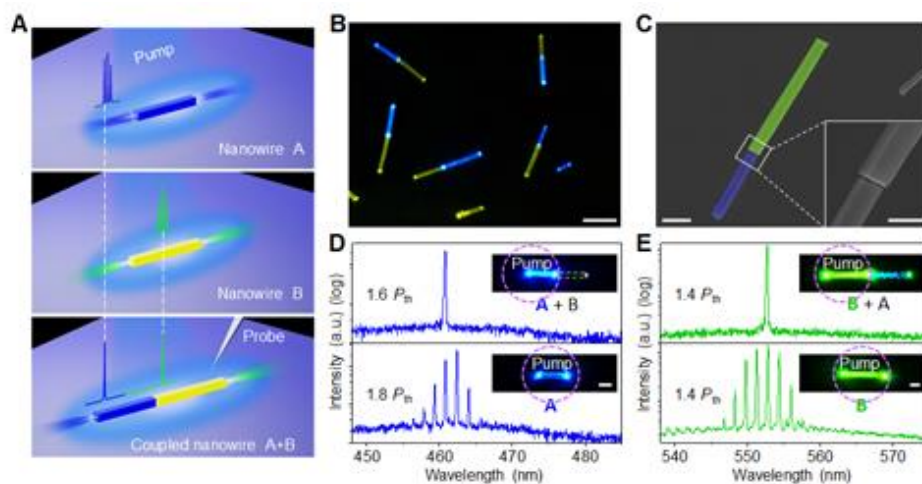


Fig. 1 Dual-color single-mode lasing in axially coupled organic nanowire resonators

关键词: 有机激光材料; 有机复合材料; 多色激光; 激发态过程

参考文献

- [1] W. Zhang, J. Yao, Y. S. Zhao, *Acc. Chem. Res.* **2016**, 49, 1691.
- [2] C. Zhang, C.-L. Zou, H. Dong, Y. Yan, J. Yao, Y. S. Zhao, *Sci. Adv.* **2017**, 3, e1700225.
- [3] C. Qiao, C. Zhang, Z. Zhou, H. Dong, Y. Du, J. Yao, Y. S. Zhao, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 15992.
- [4] C. Qiao, C. Zhang, Z. Zhou, J. Yao, Y. S. Zhao, *CCS Chem.* **2022**, 4, 250.

杂原子嵌入调控的二维 sp^2 -碳连接晶态共轭聚合物

张帆^{1,*}

¹上海交通大学化学化工学院, 东川路 800 号, 200240

*Email: fan-zhang@sjtu.edu.cn

二维材料具有独特的各向异性、可高致密度组装、多尺度加工以及丰富的物性等优点, 极大丰富了材料学的研究范畴, 表现出巨大的发展潜力, 而对二维材料结构和性质的持续探索, 是推动这一领域发展的关键和不竭源泉。其中, 以共价有机框架为代表的二维晶态聚合材料具有传统线性/枝化聚合物的高度可设计性和轻质富碳骨架等特点, 同时, 拥有类似石墨烯的二维刚性结构, 并以层状堆叠的方式形成长程有序组装体, 可通过丰富的聚合单体及桥连单元的变化, 获得富于变化的拓扑结构和进行图案化编辑等, 因而, 表现出高的比表面积和丰富开放的有序微纳孔道, 可与石墨烯、碳纳米管等纳米碳基材料有效结合或复合^[1]。这里, 将结合本课题组在二维 sp^2 -碳桥连共轭聚合物方面的代表性工作, 阐述杂原子嵌入修饰在活化碳格缩合反应、获得高晶态二维共轭结构, 以及调控其物性等方面的重要作用, 研究这些材料的物质传输和电子传递行为, 及其在光催化等方面的潜在应用性^{[2]-[4]}。

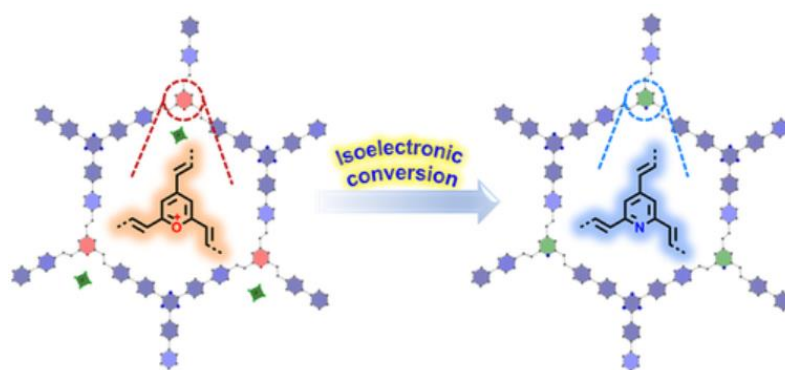


Fig. 1 2D vinylene-linked high-crystalline conjugated polymers with heteroatom-tuned structures

关键词: 二维共轭聚合物; 亚乙烯基桥连; 杂原子嵌入; 光催化

参考文献

- [1] Liang, R.; Jiang, S.-Y.; R.-H. A; Zhao, X.; *Chem. Soc. Rev.*, **2020**, *49*: 3920.
 [2] Bi, S.; Zhang, Z.; Meng, F.; Wu, D.; Chen, J.-S.; Zhang, F.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*: e202111627.
 [3] Meng, F.; Bi, S.; Sun, Z.; Jiang, B.; Wu, D.; Chen, J.-S.; Zhang, F.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*:13614.
 [4] Bi, S.; Yang, C.; Zhang, W.; Xu, J.; Liu, L.; Wu, D.; Wang, X.; Han, Y.; Liang, Q.; Zhang, F.; *Nat. Commun.* **2019**, *10*: 2467.

倍增型有机光电探测研究进展

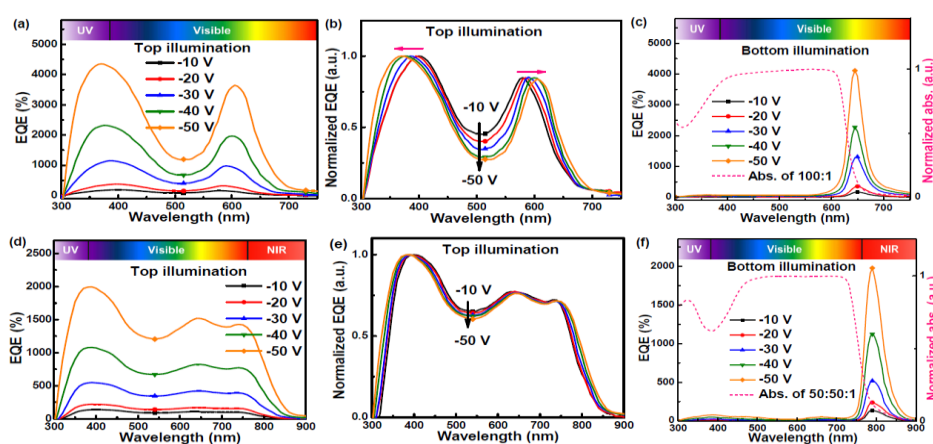
张福俊

1 北京交通大学 理学院 发光与光信息教育部重点实验室

*通讯作者. E-mail: fjzhang@bjtu.edu.cn

在倍增型有机光电探测器方面，由于有机材料的激子结合能较大，不可能产生电子的倍增及碰撞离化现象，因此无法制备出基于过热电子的倍增型有机光电探测器。2013年我的课题组开始探索全新机理的倍增型有机光电探测器，2015年报道了基于单载流子有源层制备出界面附近受陷电荷诱导能带弯曲的倍增型有机光电探测器，并通过器件工程实现响应范围可调、正、反向偏压下都能工作且响应范围可调的器件。从有源层中载流子传输通道的调控入手，率先报道了一种具有单载流子传输特性的低暗电流、倍增型有机光电探测器。通过三元策略、厚膜策略调控有源层中光场分布、界面工程及优化电极等，制备出响应范围可调、双向偏压、双探测窗口及功能集成化的倍增型有机光电探测器。

关键词：光电探测器；倍增；量子隧穿；



参考文献

- [1] Fujun Zhang*, et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 11 (2020) 366.
- [2] Fujun Zhang*, et al., *Adv. Opt. Mater.* 6 (2018) 1800001
- [3] Fujun Zhang*, et al., *Nano Lett.* 17 (2017) 1995
- [4] Fujun Zhang*, et al., *Adv. Opt. Mater.* 6 (2018) 1800249
- [5] Fujun Zhang* et al. *Adv. Funct. Mater.* 31 (2021) 2106009

基于芘二酰亚胺 PyDI 的新型有机半导体材料

张浩力

兰州大学功能有机分子化学国家重点实验室，邮编 730000

*Email: haoli.zhang@lzu.edu.cn

近年来有机半导体材料的研究取得了长足的进展，但不同类型有机半导体材料的发展并不平衡。例如，n-型有机半导体材料的发展远远落后于p-型材料，主要表现在数量和种类远少于p-型材料，迁移率偏低及空气中稳定性不足等。缺乏优秀的n-型材料极大地限制了高性能有机光电器件的开发及应用。此外，如何设计兼具高迁移率与高发光效率的有机半导体材料仍然具有很大的挑战。芘是一类具备良好发光性能的富电子稠环芳香化合物，是理想的设计n-型半导体材料的结构单位。我们课题组首次报道了4,5,9,10-芘二酰亚胺（PyDI）衍生物的合成方法。PyDI是一类兼具高迁移率与良好发光性能的n-型有机半导体小分子。基于PyDI的单晶场效应晶体管器件显示了出色电子迁移率，足以媲美经典的芘二酰亚胺（PDI）和萘二酰亚胺（NDI）衍生物。同时PyDI还显示出了激基缔合物及双光子荧光性能等有趣的发光性质。我们发展了系列基于PyDI骨架的新型n-型有机半导体材料，这些材料在有机场效应晶体管、有机存储器、非线性光学器件和有机光伏器件等领域展示了广阔的应用前景。

关键词：有机半导体，有机场效应晶体管，有机光伏器件，有机存储器，非线性光学

参考文献

- [1] W. J. Sun; Y. T. Wang; Y. Zhang*; B. Sun; Z. Q. Zhang; M. J. Xiao; X. Y. Li; Y. Huo; J. Xin; Q. Zhu; W. Ma; H. L. Zhang*. A Cathode Interface Layer Based on 4,5,9,10-Pyrene Diimide for Highly Efficient Binary Organic Solar Cells. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, **61**, e202208383.
- [2] H. Jiang*; S. Zhu*; Z. Cui; Z. Li; Y. Liang; J. Zhu; P. Hu; H. L. Zhang*; W. Hu*. *Chem. Soc. Rev.*, **2022**, **51**, 3071-3122
- [3] C. L. Sun; J. Li; Q. W. Song; Y. Ma; Z. Q. Zhang; J. B. De; Q. Liao; H. Fu*; J. Yao*; H. L. Zhang*. Lasing from an Organic Micro-Helix. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, **59**, 11080-11086.
- [4] Z. H. Wu; Z. T. Huang; R. X. Guo; C. L. Sun; L. C. Chen; B. Sun; Z. F. Shi; X. Shao; H. Li*; H. L. Zhang* *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, **56**, 13031-13035.

有机光伏材料聚集态结构调控优化器件性能

张茂杰^{1,2*}

1. 苏州大学材料与化学化工学部, 苏州市工业园区仁爱路 199 号, 215123

2. 山东大学国家胶体材料工程技术研究中心, 山东省济南市历城区山大南路 27 号, 250100

*Email: mjzhang@sdu.edu.cn

有机太阳能电池具有制备工艺简单、成本低、重量轻以及可制备大面积柔性器件等突出优点, 一直是能源高分子领域研究热点之一。过去五年中, 基于窄带系非富勒烯受体材料的有机太阳能电池的能量转化效率取得迅速发展。由于有机光伏材料的吸收光谱、分子能级以及活性层共混形貌都与其聚集态结构有关, 因此聚集态结构的调控对改善器件性能起着关键作用。鉴于此, 我们做了以下三个方面的工作: (1) 采用三元共聚策略, 将杂原子取代的受体单元作为第三组分引入到PM6分子骨架中, 抑制聚合物调节聚合物的结晶和排列, 将有机太阳能电池的效率提高到17.6%^[1,2]; (2) 改变小分子给体的共轭 π 桥, 调控其堆积方式, 获得效率接近14%的全小分子有机太阳能电池^[3]; (3) 利用三元共聚策略, 协同优化电压损失和活性层聚集态结构, 获得接近19%的器件效率^[4,5]。

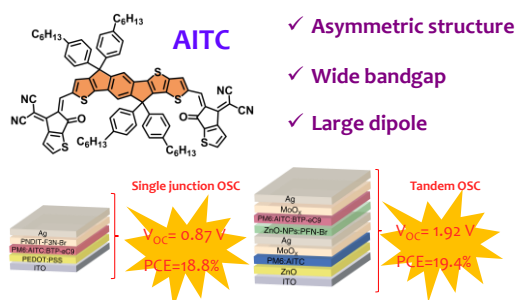


Fig. 1 the photovoltaic performance of OSCs based on the blend with AITC

关键词: 有机光伏材料; 聚集态结构; 分子堆积; 结晶性; 太阳能电池

参考文献

- [1] Wu, J.; Li, G.; Fang, J.; Guo, X.; Zhu, L.; Guo, B.; Wang, Y.; Zhang, G.; Arunagiri, L.; Liu, F.; Yan, H.; Zhang, M.; Li, Y., *Nat. Commun.* **2020**, *11*, 4612
- [2] Guo, X.; Fan, Q.; Wu, J.; Li, G.; Peng, Z.; Su, W.; Lin, J.; Hou, L.; Qin, Y.; Ade, H.; Ye, L.; Zhang, M.; Li, Y., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 2322–2329
- [3] Wang, Y.; Wang, Y.; Zhu, L.; Liu, H.; Fang, J.; Guo, X.; Liu, F.; Tang, Z.; Zhang, M.; Li, Y., *Energy Environ. Sci.*, **2020**, *13*, 1309.
- [4] Liu, Q.; Wang, Y.; Fang, J.; Liu, H.; Zhu, L.; Guo, X.; Gao, M.; Tang, Z.; Ye, L.; Liu, F.; Zhang, M.; Li, Y., *Nano Energy* **2021**, *85*, 105963.
- [5] Wang, J.; Zhang, M.; Lin, J.; Zheng, Z.; Zhu, L.; Bi, P.; Liang, H.; Guo, X.; Wu, J.; Wang, Y.; Yu, L.; Li, J.; Lv, J.; Liu, X.; Liu, F.; Hou, J.; Li, Y., *Energy & Environ. Sci.* **2022**, *2022*, 15, 1585-1593.

共振辅助氢键在有机半导体材料中的应用

刘丙永, 杨伟, 张拔, 张容, 张清*

上海交通大学, 化学化工学院, 上海市闵行区, 东川路 800 号, 200240

*Email: qz14@sjtu.edu

共振辅助氢键 (RAHB) 是一种特殊的氢键, 当氢键的供体和受体是通过 π 共轭骨架相连接, 例如 β -二酮的烯醇式结构 (图1), 在 π 电子离域的影响下, RAHB 比仅基于静电相互作用的普通氢键强。这种分子内强氢键和共轭结构的协同作用, 会增强 π 共轭结构的平面性, 同时提高分子的可极化性。我们合成了氨基甲酸酯取代的噻吩-噻唑并噻唑-噻吩 (CTZ) 作为半导体高分子的构筑单元。氨基甲酸酯的氢原子能够同相邻噻唑环上的氮原子形成RAHB。X-射线单晶衍射分析表明, RAHB相互作用促进了CTZ的共面性和相邻分子之间的紧密堆积。CTZ在单晶体中采取了层状堆积方式, 而以前报道的TTZ类分子在单晶体中是鱼骨状堆积。我们合成了两种基于CTZ的新型 π 共轭高分子PCTZ-T和PCTZ-B。基于PCTZ-T的OFET的平均空穴迁移率为 $1.98 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 阈值电压为-2.1至-5.7 V, 开/关电流比为 $10^6 - 10^7$ 。它远高于对应参照高分子P3 (侧链为烷基, 没有氢键相互作用) 的载流子迁移率 ($0.076 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)。使用具有RAHB作用的新型高分子为给体, Y6为受体的体异质结有机光伏器件达到了13.6%的光电转换效率。结果表明, RAHB这种分子内强氢键和 π -共轭的协同作用显著提高了材料的半导体性能。RAHB有可能成为设计高性能有机半导体聚合物的有效策略。工作也为非共价相互作用在有机半导体材料中的应用提供了新的视角。

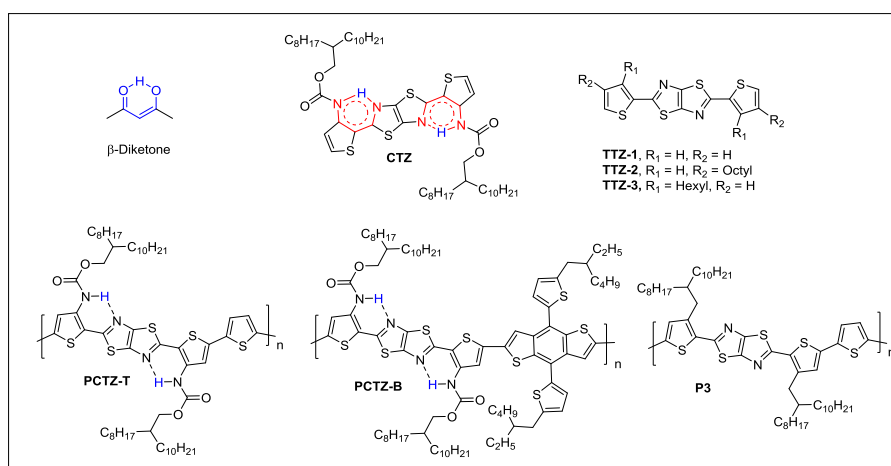


Fig. 1 RAHM interactions and semiconducting polymers

关键词: 共振辅助氢键; 非共价相互作用; 有机半导体

参考文献

- [1] Gilli, P.; Gilli, G. *The Nature of the Hydrogen Bond*; Oxford University Press Inc., 2009.
 [2] Liu, B.; Li, J.; Zeng, W.; Yang, W.; Yan, H.; Li, D.; Zhou, Y.*; Gao, X.*; Zhang Q.* "High-Performance Organic Semiconducting Polymers by a Resonance-Assisted Hydrogen Bonding Approach" *Chem. Mater.* 2021, 33, 2, 580–588.

Application of the “noncovalently conformational locks” strategy in the design of organic photovoltaic materials

Xin Zhang (张昕)^{1,*}, Hui Huang^{1,*}

¹College of Materials Science and Opto-Electronic Technology, University of Chinese Academy of Sciences, No.1 Yanqihu East Rd, Huairou District, Beijing, 101408

*Email: zhangxin2019@ucas.ac.cn

“Noncovalently conformational locks (NoCLs)” is considered as a design strategy that can lock the planar conformation via weak intramolecular interactions, thereby enhancing the planarity and rigidity of the conjugated backbones. In recent years, NoCLs strategy has been widely used in many organic photoelectric fields, such as organic solar cells, organic field effect transistors, and organic photodetectors, fully demonstrating their application potential.

In recent years, we have been working on how to flexibly applying this strategy to the design of organic photovoltaic materials, including nonfused-ring electron acceptors, oligomeric fused-ring electron acceptors, small molecular donors, and highly effective solid additives. It is worth mentioning that the high-performance and low-cost non fused rings we have designed and developed have repeatedly created the highest power conversion efficiency record based on such materials, providing new ideas and research objects for the design of low-cost and high-performance electron acceptor materials.

Keywords: Organic solar cells, Noncovalently conformational locks, Planarity and rigidity

Reference

- [1] Zhang, X.; Qin, L.; Yu, J.; Li, Y.; Wei, Y.; Liu, X.; Lu, X.; Gao, F.; Huang, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 12475.
- [2] Zhang, X.; Li, C.; Qin, L.; Chen, H.; Yu, J.; Wei, Y.; Liu, X.; Zhang, J.; Wei, Z.; Gao, F.; Peng, Q.; Huang, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, **60**: 17720.
- [3] Li, C.; Gu, X.; Chen, Z.; Han, X.; Yu, N.; Wei, Y.; Gao, J.; Chen, H.; Zhang, M.; Wang, A.; Zhang, J.; Wei, Z.; Peng, Q.; Tang, Z.; Hao, X.; Zhang, X.; Huang, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, **144**: 14731.
- [4] Gu, X.; Wei, Y.; Yu, N.; Qiao, J.; Han, Z.; Lin, Q.; Han, X.; Gao, J.; Li, C.; Zhang, J.; Hao, X.; Wei, Z.; Tang, Z.; Cai, Y.; Zhang, X.; Huang, H. *CCS Chem.* DOI: 10.31635/ccschem.31023.202202575.

茈二酰亚胺基阴极界面材料

张雅敏*, 孙文静, 王娅婷, 张浩力*

兰州大学功能有机分子化学国家重点实验室, 甘肃省兰州市城关区天水南路 222 号, 730000

*Email: zym@lzu.edu.cn

有机太阳能电池因其具有质轻、可溶液处理以及可大面积印刷制备等优势而受到众多研究者的关注。近年来, 有机太阳能电池能量转换效率迅速提升, 目前单结器件效率已超过19%。在器件优化中, 构建高效有机阴极界面层是提高光伏器件效率与稳定性的重要策略之一。

本论文围绕提升有机太阳能电池器件性能这一研究目标, 设计合成了一系列以具有高电子迁移率及独特吸收范围的4, 5, 9, 10-茈二酰亚胺 (4, 5, 9, 10-PyDI) 单元为基础结构的小分子和聚合物阴极界面材料, 并探索了其在有机光伏器件中的应用。通过调控茈二酰亚胺基阴极界面材料的结晶性、吸收范围、前线轨道能级及自掺杂能力, 构筑了光电转换效率高、对界面膜厚不敏感的有机光伏器件并研究了材料结构-基本性质-器件性能之间的构效关系, 证明了茈二酰亚胺是具有竞争力的阴极界面材料基础结构, 为设计与合成高性能阴极界面材料提供新思路。

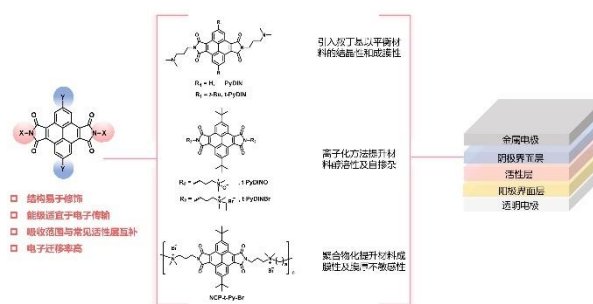


Fig. 1 The chemical structures of PyDI-based cathode interface materials.

关键词: 有机太阳能电池; 阴极界面材料; 4, 5, 9, 10-茈二酰亚胺

参考文献

- [1] Sun, W.-J.[#]; Wang, Y.-T.[#]; **Zhang, Y.***; Zhang, H.-L.* et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2022**, **61**, e202208383
- [2] Wang, W. V.; **Zhang, Y.***; Zhang, H.-L.* et al. *InfoMat*, **2021**, **3**, 814-822.
- [3] **Zhang, Y.**; Wan, X.*; Chen, Y. et al. *Adv. Energy Mater.* **2019**, **9**, 1902688.
- [4] **Zhang, Y.#**; Kan, B.#; Chen, Y.* et al. *Adv. Mater.* **2018**, **30**, 1707508.
- [5] Wang, Y.#; **Zhang, Y.#**; Chen, Y.* et al. *Adv. Energy Mater.* **2018**, **8**, 1702870.

高量子产率碳量子点的设计合成及在量子点发光二极管中的应用

张洋^{1,*}, 袁廷¹, 袁方龙¹, 范楼珍^{1,*}

¹北京师范大学, 化学学院, 100875

*Email: y.zhang@bnu.edu.cn; lzf@bnu.edu.cn

近年来, 有机电致发光二极管 (OLED) 的迅速发展推动了高清显示技术产业的不断升级。但是, OLED的核心技术分别被国外企业垄断并已形成了较高的专利技术壁垒 (包括发光层材料、传输层材料和精密金属掩膜版等), 无形中制约着我国新型显示产业链的未来发展。因此, 亟需发展不依赖高真空蒸镀工艺的新型显示材料^[1]。量子点 (QDs) 在显示色纯度和发光效率方面具有明显的技术优势, 可以实现更加精准的色彩还原并展现出更加饱满的画面色彩^[2]。无需昂贵的设备和复杂的加工程序, 量子点LED (QLED) 的发光层、载流子注入层和传输层均可通过溶液法加工成膜, 具有大规模生产的优势。碳量子点 (CQDs) 是一种环境友好的荧光碳纳米材料, 具有尺寸依赖的发射波长、易于制备、成本低廉和可溶液加工等优点^[3]。因此, 研发高效稳定和可溶液加工的CQDs对于推动高性能QLED的快速发展具有重要意义^[4]。

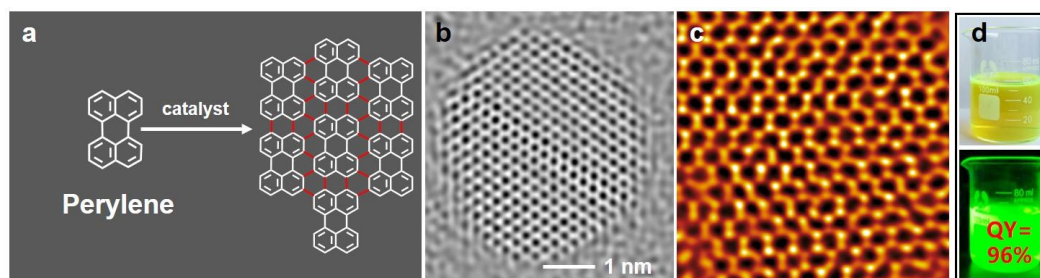


Fig. 1 (a) Schematic illustration of the synthesis, and (b-d) characterization of CQDs.

关键词: 量子点发光二极管; 碳量子点; 环境友好; 高量子产率; 可溶液加工

参考文献

- [1] Qian, L.; Zheng, L. Y.; Xue, J.; Holloway, P. H. *Nat. Photonics* **2011**, *5*: 543.
- [2] Dai, X.; Zhang, Z.; Jin, Y.; Niu, Y.; Cao, H.; Liang, X.; Chen, L.; Wang, J.; Peng, X. *Nat. Photonics* **2011**, *5*: 543.
- [3] Shi, Y.; Wang, Z.; Meng, T.; Yuan, T.; Ni, R.; Li, Y.; Li, X.; Zhang, Y.; Tan, Z.; Lei, S.; Fan, L. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*: 18941.
- [4] Yuan, T.; Yuan, F.; Sui, L.; Zhang, Y.; Li, Y.; Li, X.; Tan, Z.; Fan, L.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, e202218568.

Super-Exchange Couplings in Polymerized Small Molecule Acceptors Enable High-Efficiency All-Polymer Solar Cells

Yaogang Zhang (张要刚)¹, Lu Ning², Guangchao Han^{2,*}, Yuanping Yi^{1,*}

¹Beijing National Laboratory for Molecular Sciences, CAS Key Laboratory of Organic Solids, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190

*Email: gchaohan@iccas.ac.cn

*Email: ypyi@iccas.ac.cn

All-polymer solar cells (all-PSCs) with state-of-art Y-series polymer acceptors, especially the regioregular ones, exhibit tremendous promise for practical applications accompanied by their power conversion efficiency (PCE) already exceeding 17% in recent years. Herein, the significant role of intra-chain electron transport, which is absent in small molecular acceptors (SMAs), is first revealed by comparing four representative polymerized SMAs (PSMAs).^{1,2} The results show that intra-chain electron transfer is governed by the bridge-mediated super-exchange (SE) coupling mechanism. Moreover, it is evident that the PCEs can be enhanced by higher intra-chain SE electronic coupling, which is beneficial for electron generation and transport. Most significantly, through statistical analysis on more related PSMAs, we propose the SE electronic coupling could serve as a preliminary descriptor to screen PSMA that can achieve high-PCE devices. Meanwhile, a criterion that only when SE electronic coupling larger than 25 meV can the goal of PCE exceeding 15% be achieved is presented.

Keywords: regioregular PSMA, SE coupling

Reference

- [1] Luo, Z.; Liu, T.; Ma, R.; Xiao, Y.; Zhan, L.; Zhang, G.; Sun, H.; Ni, F.; Chai, G.; Wang, J.; Zhong, C.; Zou, Y.; Guo, X.; Lu, X.; Chen, H.; Yan, H.; Yang, C. *Adv. Mater.* **2020**, 32 (48), e2005942.
- [2] Yu, H.; Pan, M.; Sun, R.; Agunawela, I.; Zhang, J.; Li, Y.; Qi, Z.; Han, H.; Zou, X.; Zhou, W.; Chen, S.; Lai, J. Y. L.; Luo, S.; Luo, Z.; Zhao, D.; Lu, X.; Ade, H.; Huang, F.; Min, J.; Yan, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60 (18), 10137-10146.

受体小分子的合成及器件

张有地¹, 张莹悦¹, 张文强¹, 季雨童¹ 张有地^{1,*}¹ 长春师范大学化学学院, 先进绿色功能材料重点实验室, 吉林, 130032

*Email: zhangyd@ccsfu.edu.cn

近年来, 有机太阳能电池成为当前研究的热点课题, 因而受到科研工作者广泛的关注。当前最高有机光伏效率已经超过18%, 逐渐地迈向商业化阶段。报告主要介绍本课题组在这十年间的相关成果及进展, 着重阐述非富勒受体分子工程在有机光伏中的重要角色, 以及对形貌的调控和器件效率的影响。并且从茚酰亚胺类受体材料, 到ITIC以及Y6衍生物等稠环小分子的合成策略角度来剖析分子工程对有机光伏领域的重要影响。茚酰亚胺类分子是一类高电子迁移率和高稳定性受体材料, 我们从能级角度出发, 将茚酰亚胺一侧的酰亚胺剪贴构建茚单酰亚胺衍生物, 获得1.3V开路电压和6.0%的高效率器件性能。随后, 我们又在高效率Y6受体材料上改性, 合成了含有不同数量的氟原子和氯原子端基非对称稠环受体材料, 通过对端基的协同作用, 获得了16.83%器件性能。经过这十年的合成路程, 通过合成策略来调控分子的结晶性, 形成良好有序的相形貌是一种重要的途径, 同时, 分子工程是器件的重要根基, 以及形貌是提高效率的支柱, 器件性能和稳定性是迈向商业化的目标。

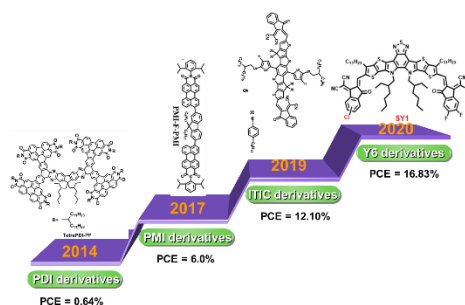


Fig.1 本课题组非富勒烯受体研究历程

关键词: 非富勒烯受体; 有机太阳能电池; 有机光伏

参考文献

- [1] Zhang, Y.; Ji, Y.; Zhang, Y.; Zhang, W.; Bai, H.; Du, M.; Wu, H.; Guo, Q.; Zhou E. *Adv. Funct. Mater.* **2022**, *35*: 2205115.
- [2] Zhang, W.; Zhang, G.; Song, H.; Kim, S.; Chen, H.; Yang, C.; Zhang, Y.; Yang, K.; Lu, S. *Sol. RRL* **2023**, *7*: 2201076.

高效率有机太阳能电池的填充因子研究

张渊¹, 张旭宁¹, 周惠琼², 孙艳明^{1,*}, 张渊^{1,*}

¹北京航空航天大学化学学院, 北京海淀区学院路 37 号, 100191

²国家纳米科学中心, 海淀区中关村北一条 11 号, 100190

*Email: yuanzhang@buaa.edu.cn

The fill factor (FF) of organic solar cells (OSC), a critically important photovoltaic parameter, is yet sub-optimal, often less than 0.8. To further reduce the FF gaps with regard to the Shockley-Queisser upper limit, we present a study unveiling the impacts of dielectric properties on obtaining high FFs and photovoltaic efficiencies in OSCs. With increasing the dielectric constant (ϵ) of non-fullerene acceptors (NFAs) and bulk heterojunction (BHJ) films, afforded by the increase of molecular packing density (MPD) of NFAs in solid states, we show that the FF penalties related to non-geminate charge recombination in OSCs can be appreciably mitigated. This conceptual modulation on FFs is embodied by a series of NFA-based BHJs where the differentiated MPDs and resultant changes of ϵ in BHJs are reflected by the difference in FFs. In particular, as exemplified by an NFA model system L8-BO tailored with branched side chains, the enlargements of MPD and ϵ allow to achieve an impressive FF of 0.815 with efficiency of 18.23% in OSCs featuring an impressively low bimolecular recombination and reduced sensitivity of FF on the BHJ film thickness.

关键词: 有机太阳能电池; 填充因子; 分子堆积密度; 介电常数; 双分子复合

参考文献

- [1] X. Zhang, Y. Sun*, Y. Zhang* et al., "High fill factor organic solar cells with increased dielectric constant and molecular packing density", *Joule*, **2022**, 6, 444-457.
- [2] X. Zhang, C. Zhang*, H. Zhou*, F. Zhang*, Y. Zhang* et al., "On the Understanding of Energy Loss and Device Fill Factor Trade-Offs in Non-Fullerene Organic Solar Cells with Varied Energy Levels," *Nano Energy*, **2020**, 75, 105032.

受体光伏材料的设计与低成本合成

张志国^{1,*}

¹北京化工大学材料学院, 北京市朝阳区北三环东路15号, 100029

²工作单位, 地址, 邮编

*Email: zgzhang@mail.buct.edu.cn

聚合物太阳能电池(PSCs)以其轻薄柔, 可低成本大规模制备, 易于与建筑一体化集成等优势而备受关注。近年来, 非富勒烯小分子受体(例如明星分子ITIC、Y6)的发展推动了PSCs光电转换效率突破了19%, 达到了商业应用的阈值。然而器件的稳定性成为PSCs商业化道路上又一大障碍。PSCs是一种基于共混体相异质结的光伏技术, 器件制备中通过精细调控聚合物给体和非富勒烯受体(SMA)的相分离以实现激子的高效拆分和传输。然而这种体相异质结结构在热力学上是不稳定的, 共混相的热力学松弛会影响到器件的长期运行稳定性。

通过将小分子受体共聚, 构筑PSMA类聚合物受体(Polymerized SMAs), 提升玻璃转换温度, 可以很好的克服SMAs类光伏器件形貌稳定性的问题¹。PSMA策略的成功, 也激发了研究人员尝试发展基于2-3个SMA单元的寡聚体以克服PSMA器件批次稳定性。不同于使用共轭单元连接SMA单元的策略, 我们又发展了柔性侧链接SMA单元的新策略², 同时他们考察了不同柔性间隔基团的长度来对TSMA受体的聚集和松弛行为、以及光伏性能的影响。

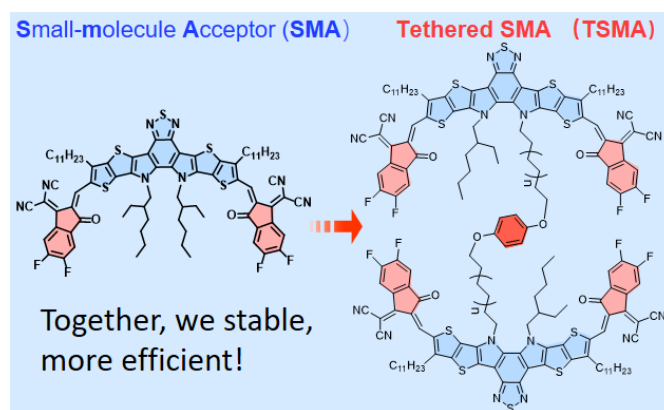


Fig. 1 Chemical structures of TSMA.

关键词: 电子受体; 稳定性; 设计与合成

考文献

[1] Zhang, Z.-G.; Li, Y., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60 (9), 4422.

[2] Li, S.; Zhang, R.; Zhang, M.; Yao, J.; Peng, Z.; Chen, Q.; Zhang, C.; Chang, B.; Bai, Y.; Fu, H.; Ouyang, Y.; Zhang, C.; Steele, J. A.; Alshahrani, T.; Roeffaers, M. B. J.; Solano, E.; Meng, L.; Gao, F.; Li, Y.; Zhang, Z.-G., *Adv. Mater.* 2023, 35 (2), 2206563.

协同掺杂效应在非富勒烯太阳能电池中的应用

陈智慧¹, 刘瑶^{2,*}¹ 中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 10010² 北京化工大学, 北京市朝阳区北三环东路15号, 100020

*Email: liuyao@mails.buct.edu.cn

模糊而复杂的界面掺杂作用使新型阴极界面材料的分子设计面临挑战, 阻碍了非富勒烯有机太阳能电池 (OSCs) 光电性能的发展。我们首次深入研究了阴极界面材料的自掺杂作用以及其对活性层中受体产生的掺杂作用, 提出了同步掺杂效应。研究表明, 具有吸电子共轭中心的C₆₀-N同时具有良好的非富勒烯受体掺杂和自掺杂作用, 即同步掺杂效应 (如图Fig. 1所示), 有效地促进了阴极界面处电荷的传输和收集, 使基于PM6:L8-BO的二元OSCs获得了> 18%的光电转换效率。这一发现为有机电子学中高性能阴极界面材料的分子设计提供了可靠的理论指导。

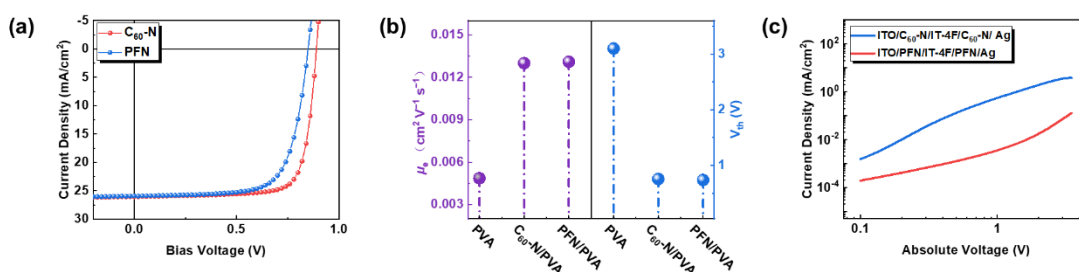


Fig. 1 (a) The optimal J-V curves based on C₆₀-N and PFN modified PM6:L8-BO OSCs. (b) The electron mobilities and threshold voltage extracted from organic field-effect transistors with PVA, C₆₀-N/PVA, and PFN/PVA as insulators. (c) Space charge-limited current measurements for C₆₀-N and PFN based IT-4F electron-only devices.

我们进一步开发了具有多位点修饰作用的新型阴极界面修饰材料, PDI-EA和NDI-EA (如图Fig. 2所示), 通过同时引入多个位点的羟基和胺基作为掺杂功能单元, 有效地增强了掺杂作用, 并且明显改善阴极/活性层界面处的能级排列, 最终基于PM6:L8-BO的二元OSCs获得了18.5%的光电转换效率, 这是PM6:L8-BO二元OSCs中报道的最高值之一。

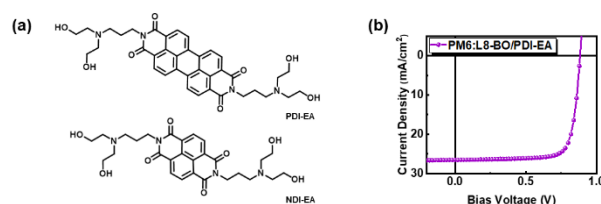


Fig. 2 (a) Schematic molecular structures of PDI-EA and NDI-EA. (b) The optimal J-V curves based on PDI-EA modified PM6:L8-BO OSCs.

关键词: 阴极界面材料; 非富勒烯太阳能电池; 协同掺杂效应

参考文献

[1] Chen, Z.; Huang, Y.; Gao, J.; Zhang, L.; Ma, Z.; Liu, M., Emrick, T., Liu, Y. *ACS Energy Lett.* **2022**, *7*: 4052.

[2] Chen, Z.; Li, Q.; Jiang, Y.; Lee, H.; Ma, Z.; Russel, T., Liu, Y. *J. Mater. Chem. A* **2022**, *10*: 16163.

聚合小分子受体在全小分子有机太阳能电池中的界面调节作用

张子祺^{1,2}, 邓丹^{2,*}, 李祎^{1,3}, 丁建伟^{1,2}, 吴琼^{1,2}, 张莉莉^{1,2}, 张光杰¹,

Muhammad Junaid Iqbal^{1,2}, 王瑞¹, 张建齐¹, 裘晓辉^{1,2,*}, 魏志祥^{1,2,*}

¹ 国家纳米科学中心, 北京市海淀区中关村北一条 11 号, 100190

² 中国科学院大学, 北京市石景山区玉泉路 19 号 (甲), 100049

³ 天津大学, 天津市南开区卫津路 92 号, 300072

*Email: dengd@nanoctr.cn, qiuxh@nanoctr.cn, weizx@nanoctr.cn

在全小分子有机太阳能电池 (ASM-OSC) 中, 为了能够实现有效的激子解离和电荷传输以提高能量转换效率 (PCE), 最重要的问题是如何调节和优化 ASM-OSC 的活性层形貌。由于小分子材料在溶液成膜过程中倾向于形成更大的畴区, 且畴区界面处的分子堆积松散, 高效的 ASM-OSC 需要给体和受体之间具有更强的相互作用, 以促进互穿网络的形成。在本论文中, 作者在 ZR-TT 和 Y6^[1] 体系中添加 3% 的聚合小分子受体 PJ1^[2], 使得 PCE 从 14.33% 提高到 15.54%。研究表明, PJ1 在活性层中处于给受体界面, 能够增强给体受体相互作用, 从而实现共混膜的结晶性提高, 薄膜更加致密, 畴区尺寸减小。更优化的活性层形貌使得空穴转移速率加快, 电子和空穴迁移率增加, 从而促进载流子的产生和输运。此外, 本文还证明了这种界面调节剂策略的通用性。该项研究工作指出了 ASM-OSC 在界面区域具有较大的改进空间, 同时对有机太阳能电池中高效添加剂或第三组分的选择和设计提供了有效的指导。

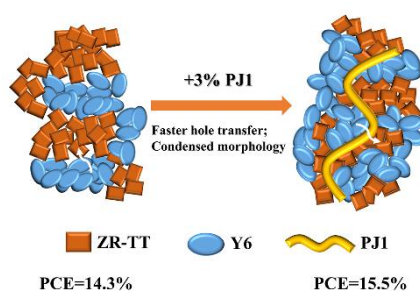


Fig. 1 Schematic diagram of morphology for blend film with and w/o PJ1 addition

关键词: 有机太阳能电池; 全小分子; 聚合小分子受体; 界面调节

参考文献

- [1] Yuan, J.; Zhang, Y.; Zhou, L.; Zhang, G.; Yip, H.-L.; Lau, T.-K.; Lu, X.; Zhu, C.; Peng, H.; Johnson, P. A.; Leclerc, M.; Cao, Y.; Ulanski, J.; Li, Y.; Zou, Y. *Joule* **2019**, *3*: 1140.
- [2] Jia, T.; Zhang, J.; Zhong, W.; Liang, Y.; Zhang, K.; Dong, S.; Ying, L.; Liu, F.; Wang, X.; Huang, F.; Cao, Y. *Nano Energy* **2020**, *72*: 104718.

基于有机场效应晶体管的丙酮传感研究

赵皓臻, 张凤娇*

中国科学院大学化学科学学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

*Email: fjiaozhang@ucas.ac.cn

人体呼出气体与新陈代谢息息相关, 通过对呼出气体含量变化的实时监测, 是对健康信息的直观反映方式之一^[1]。有机电子传感器通过将化学信号转化为电信号, 被广泛应用于对呼出气体等代谢产物的灵敏探测。但面向呼出气体的传感研究, 还面临着成分复杂、待测物含量较低等难题, 所以创建高灵敏度和高选择性的传感器是领域发展关键。有机场效应晶体管 (OFET) 作为一种三端有源器件, 可以通过栅压调控导电沟道内载流子浓度, 具有良好的信号放大功能^[2]; 同时利用被检测物对载流子浓度以及传输行为的影响, 该类器件可以将化学以及物理信号转化为电信号, 有利于开展多重信号以及微小信号的识别监测, 是发展呼吸传感的良好载体^[3]。

本工作通过有机半导体和金属氧化物纳米颗粒混合, 结合剪切拉膜技术创建有机半导体复合功能层, 发展对丙酮具有高灵敏度和高选择性的OFET传感器, 系统研究薄膜微观结构与传感性能关系, 从而实现对面呼出气体中丙酮的监测, 以期发展面向健康监测的生物电子器件。

关键词: 场效应晶体管; 传感; 呼出气体; 疾病检测

参考文献

- [1] Zhang, F. J., Qu, G., Mohammadi, E., Mei, J. G., Diao, Y. *Adv. Funct. Mater.* **2017**, **27**, 1701117.
- [2] Moo Yeol Lee, Hae Rang Lee, Cheol Hee Park, Seul Gi Han, and Joon Hak Oh. *Acc. Chem. Res.* **2018**, **51** (11), 2829-2838
- [3] Congcong Zhang, Penglei Chen, and Wenping Hu. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, **44**, 2087-2107

有机半导体聚集态结构与柔性器件性能研究

赵岩

复旦大学，上海市杨浦区邯郸路 220 号，200433

*Email: zhaoy@fudan.edu.cn

随着信息终端从大型主机向便携及可穿戴设备逐渐推进，柔性电子已成为世界各国竞相发展的前沿技术领域。聚合物半导体具备良好的柔性、溶液加工性和低制造成本等优势，在新一代可拉伸电路和柔性光电设备领域展现出巨大的应用潜力。共轭聚合物主链的 π 共轭结构堆积使其呈现半结晶特性，虽然有利于载流子的传输，但也限制了聚合物的拉伸性。明确聚合物的聚集形态对于理解和调控其拉伸性能和电学性能至关重要。本工作研究了 DPP 类半导体的薄膜聚集形态随温度、应变的变化，揭示玻璃化转变前后器件性能的转变机制，为可拉伸 OFET 器件的分子结构设计提供依据。

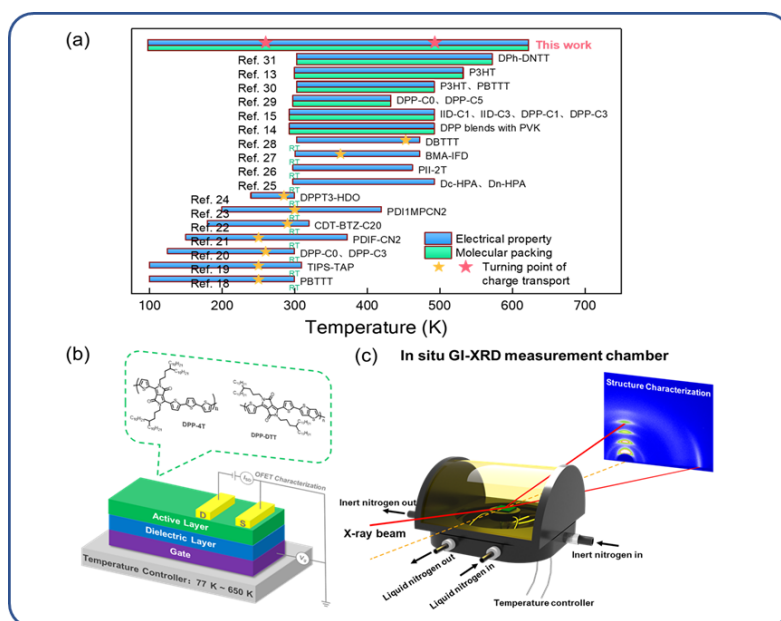


Fig. 1 Illustration of the in situ temperature-dependent transistor measurement and GI-XRD measurement.

关键词：有机半导体；聚合物半导体；柔性半导体；聚集态

参考文献

- [1] Yang, L., Wu, Y., Yan, Y., Wang, Z., Qiao, Y., Chang, D., Zhang, C., Wang, Y., Lu, X., Liu, Y., Zhao, Y., Molecular Packing and Charge Transport Behaviors of Semiconducting Polymers Over a Wide Temperature Range. *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32, 2202456.

高效稳定 Cs 基钙钛矿的化学创制

赵一新

¹上海交通大学, 上海市东川路 800 号, 200240

*Email: yixin.zhao@sjtu.edu.cn

铅卤钙钛矿太阳能电池凭借高效率、低成本和生产工艺简便的特点异军突起。课题组在前期针对钙钛矿太阳能电池领域的大面积、高效率、高稳定性研究目标, Cs 基钙钛矿是实现高效稳定的理想钙钛矿材料, 基于维度转化和维度调控的思路解决了 Cs 钙钛矿可控结晶, 缺陷钝化和表界面稳定化的挑战, 初步实现了钙钛矿可控制备和高效率器件的目标。近 5 年, 聚焦于钙钛矿稳定性这一关键科学问题: 开发 MA 和 DMA 添加剂解决了 Cs 基钙钛矿的结晶动力学不匹配; 发展了维度调控和表面端基化策略提升了 Cs 基钙钛矿的晶相稳定性; 理论预测和实验验证了高效稳定的 β 相 CsPbI₃ 无机钙钛矿, 通过协同结晶和结晶去耦合等策略化学设计了 FA-Cs 钙钛矿的合金化均匀结晶实现高效率和高稳定性。

关键词: 钙钛矿太阳能电池; Cs; 无机钙钛矿, FA-Cs 钙钛矿

参考文献

- [1] Chen, H.; Wang, Y.; Fan, Y.; Chen, Y.; Miao, Y.; Qin, Z.; Wang, X.; Liu, X.; Zhu, K.; Gao, F.; Zhao, Y., Decoupling engineering of formamidinium-cesium perovskites for efficient photovoltaics. *Nat. Sci. Rev.* 2022, 9 (10), nwac127.
- [2] Wang, X.; Wang, Y.; Chen, Y.; Liu, X.; Zhao, Y., Efficient and Stable CsPbI₃ Inorganic Perovskite Photovoltaics Enabled by Crystal Secondary Growth. *Adv. Mater.* 2021, 33 (44), e2103688.
- [3] Liu, X.; Wang, X.; Zhang, T.; Miao, Y.; Qin, Z.; Chen, Y.; Zhao, Y., Organic Tetrabutylammonium Cation Intercalation to Heal Inorganic CsPbI₃ Perovskite. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60 (22), 12351-12355.
- [4] Chen, Y.; Liu, X.; Wang, T.; Zhao, Y., Highly Stable Inorganic Lead Halide Perovskite toward Efficient Photovoltaics. *Acc. Chem. Res.* 2021, 54 (17), 3452-3461.
- [5] Wang, Y.; Liu, X.; Zhang, T.; Wang, X.; Kan, M.; Shi, J.; Zhao, Y., The Role of Dimethylammonium Iodide in CsPbI₃ Perovskite Fabrication: Additive or Dopant? *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58 (46), 16691-16696.
- [6] Wang, Y.; Dar, M. I.; Ono, L. K.; Zhang, T.; Kan, M.; Li, Y.; Zhang, L.; Wang, X.; Yang, Y.; Gao, X.; Qi, Y.; Grätzel, M.; Zhao, Y., Thermodynamically stabilized β -CsPbI₃-based perovskite solar cells with efficiencies >18%. *Science* 2019, 365 (6453), 591-595.
- [7] Wang, Y.; Zhang, T.; Kan, M.; Zhao, Y., Bifunctional Stabilization of All-Inorganic α -CsPbI₃ Perovskite for 17% Efficiency Photovoltaics. *J. Am. Chem. Soc.* 2018, 140 (39), 12345-12348.
- [8] Zhang, T.; Dar, M. I.; Li, G.; Xu, F.; Guo, N.; Grätzel, M.; Zhao, Y., Bication lead iodide 2D perovskite component to stabilize inorganic α -CsPbI₃ perovskite phase for high-efficiency solar cells. *Sci. Adv.* 2017, 3 (9), e1700841.

有机功能材料光物理过程中的量子相干现象

赵仪

厦门大学化学化工学院, 邮编 361005

*Email: yizhao@xmu.edu.cn

在有机功能材料光物理过程中, 最常见的量子相干现象是光吸收和发射过程中表现出来的J聚集体和H聚集体的性质, J聚集中光吸收表现出红移现象, 而H聚集体中具有蓝移现象。这种光物理多通道中的量子干涉现象广泛存在于聚集体中的电荷、能量转移等过程中, 并对有机功能材料的光电性质起着重要作用。在本报告中, 我们介绍课题组在该领域开展的几个理论方面的研究工作。在有机聚集体单线态裂分中, 发现相干离域的激子运动并非总是帮助激子裂分, 存在一个最优的激子耦合强度, 在此条件下的激子传输可使得裂分效率最大化; 在聚集体吸收光谱中, 除了传统的J和H聚集效果外, 电荷转移态的存在使得光谱强度和位置发生明显的变化, 并重要影响激子扩散过程, 其根本原因在于电荷转移态的超交换作用; 在聚集体磷光发射过程中, 也可以引入J和H聚集体的概念, 利用相干性质可进一步灵活地控制增强或抑制辐射和非辐射衰变通道。

关键词: 有机聚集体; 光物理; 量子相干; 超快动力学

葫芦[7]脲对以亮氨酸为 N-端的三肽选择性识别的理论研究

赵盈¹, 李菲², 马纷纷³, 支俊格¹, 吴光鹭^{2,*}, 郑小燕^{1,*}¹北京理工大学化学与化工学院, 北京理工大学良乡校区南区, 100081²吉林大学化学学院, 130012³姑苏实验室, 苏州, 215123

*Email: xiaoyanzheng@bit.edu.cn, guanglu@jlu.edu.cn

合成的超分子主体如葫芦脲能够与众多客体分子通过非共价相互作用结合^[1-3], 从而拓展了其在生物医学领域的应用前景。本研究以设计出的一系列以 Leu 为 N-端的三肽和葫芦[7]脲 (CB[7]) 为研究对象, 采用分子动力学模拟 (MD) 等方法探究了相邻残基对三肽与 CB[7] 结合的影响以及主客体分子识别的序列选择性。结果发现, 与 LGG 相比, 只有当第三个残基为赖氨酸 (R) 时, CB[7] 与 LGR 的结合达到了纳摩尔级别, 结合常数 (K_a) 为 $1.1 \times 10^9 \text{ M}^{-1}$ 。另外, CB[7] 对以 Leu 为 N-端的三肽的识别具有序列选择性, 无论是改变三肽的序列 (从 LGR 到 LRG), 还是增加三肽的长度 (从 LGR 到 LGGR), K_a 都降低了约 3 个数量级。有趣的是, 将 N-端的 Leu 替换为其异构体 Ile 后, CB[7] 与三肽的结合强度显著减弱, K_a 降低了 3-8 个数量级, 因此 CB[7] 可以有效区分以 Leu 为 N-端的三肽和以 Ile 为 N-端的三肽。另外, 我们预测当 R 在三肽的 C-端时, 无论 N-端残基是芳香族氨基酸^[1-3] 还是 Leu, 结合强度都接近纳摩尔水平。因此, 在实际应用中可以通过引入 R 设计出与 CB[7] 结合较强的多肽, 进而达到识别的目的^[4]。

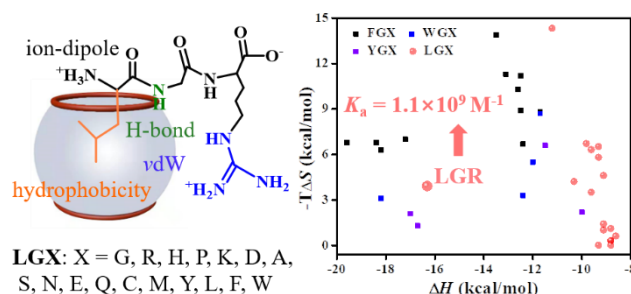


Fig. 1 The molecular recognition of CB[7] to N-terminal Leu-containing tripeptides.

关键词: 葫芦[7]脲; 主客体识别; 选择性识别; 分子动力学模拟

参考文献

- [1] Ma, F. F; Zheng X. Y; Xie J. *Int. J. Quantum Chem.* **2021**, **121**: e26491.
- [2] Ma, F. F; Zheng X. Y; Xie L. X; Li Z. S. *J. Mol. Liq.* **2021**, **328**, 115479.
- [3] Ma, F. F; Zheng X. Y; Li Z. S. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, **23**, 13724-13733.
- [4] Zhao, Y.; Li, F.; Ma, F. F.; Zhi, J. G; Wu G. L; Zheng X. Y. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, **25**, 7893-7900.

有机微纳激光材料与器件

赵永生¹,

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号, 10019

*Email: yszhao@iccas.ac.cn

激光是20世纪以来人类最重大伟大的发明之一, 随着科技的进步, 激光技术也不断发展, 其中微纳激光是激光技术与纳米科学交叉产生的研究前沿。在微纳尺度, 激光器三要素(谐振腔、增益介质、泵浦源)同传统激光器相比都有显著的不同。

有机材料在发光效率、柔性、加工性等方面表现出独特的优势。有机分子种类丰富, 结构可设计, 性能可剪裁, 在材料选择方面有很大的灵活性, 同时有机材料一般具有较大的光吸收和光辐射截面, 利用有机材料易掺杂的特性, 可以实现全波段连续可调的受激发射, 解决目前紫外和红外波段激光材料短缺的问题。更为关键的是, 有机激光产生的过程中涉及全新的粒子数反转与受激发射机理。一方面有机材料中丰富的激发态过程为构筑有利于粒子数反转所需要的四能级系统提供了更加有效和可控的手段; 另一方面, 材料在受激状态下表现出的各种光谱特性, 为我们深入研究不同有机分子的激发态动力学过程提供了更加有力的手段。

关键词: 有机激光; 激光显示; 有机纳米光子学

参考文献

- [1] J. Zhao, Y. Yan, Z. Gao, Y. Du, H. Dong, J. Yao, Y. S. Zhao. *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 870.
- [2] K. Wang, Z. Gao, W. Zhang, Y. Yan, H. Song, X. Lin, Z. Zhou, H. Meng, A. Xia, J. Yao, Y. S. Zhao. *Science Advances* **2019**, *5*, eaaw2953.
- [3] C. Zhang, C.-L. Zou, H. Dong, Y. Yan, J. Yao, Y. S. Zhao. *Science Advances* **2017**, *3*, e1700225.
- [4] C. Zhang, C.-L. Zou, Y. Zhao, C.-H. Dong, C. Wei, H. Wang, Y. Liu, G.-C. Guo, J. Yao, Y. S. Zhao. *Science Advances* **2015**, *1*, e1500257.
- [5] W. Zhang, J. Yao, Y. S. Zhao. *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 1691.

二维聚合富勒烯

郑健^{1,*}

¹ 中国科学院化学研究所, 100190

*Email: zhengjian@iccas.ac.cn

制备新型碳材料一直是物质科学领域的前沿课题, 以富勒烯、碳纳米管、石墨烯、石墨炔为代表的新型碳材料的每一次发现都引发研究热潮。由于缺乏有效、可靠的合成方法, 使得新型碳材料的发现具有极大的挑战。

本课题组开发了一种制备新型碳材料的合成策略, 成功制备了单层二维聚合C₆₀单晶, 并获得了清晰的价键结构^[1]。通过调节镁(Mg)和C₆₀的比例, 在常压条件下制得了两种紧密排列的准六方相和准四方相的Mg插层聚合物单晶。通过有机阳离子切片策略, 使用四丁基水杨酸铵作为切割试剂, 从准六方相结构中剥离得到单层C₆₀聚合物。单晶X射线衍射和扫描隧道电子显微镜表征结果表明C₆₀之间通过碳-碳桥连单键和[2+2]环加成的四元环桥连键, 在平面内连接形成了一种全新的二维拓扑超结构。该研究为碳材料家族再添一名新成员, 这种利用零维团簇代替碳原子构筑二维拓扑结构的方法, 为新型碳材料的探索提供了新的思路。

单层聚合C₆₀的带隙约为1.6 eV, 是典型的半导体, 预示着其在光/电半导体器件中具有广阔的应用前景。由于不对称成键结构, 这种新的碳材料具有显著的面内各向异性等优异特性, 其独特的共轭结构、晶格和多孔骨架结构, 使得该二维碳材料在超导、量子计算、自旋输运、信息及能量存储、催化等领域也具有潜在的应用。

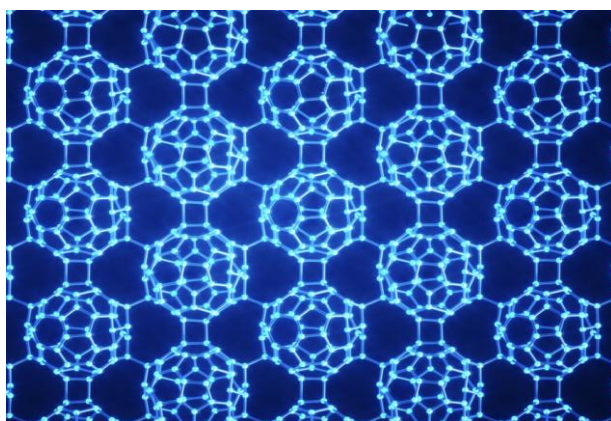


Fig. 1 准六方二维聚合C₆₀的晶体结构

关键词: 碳材料, 二维材料, 富勒烯

参考文献

[1] Hou L, Cui X, Guan B, Wang S, Li R, Liu Y, Zhu D, Zheng J*. *Nature*. **2022**, 606, 507.

Solution-processable through-space charge-transfer emitters via solubilizing groups modification

Qi Zheng (郑琦)¹, Xue-Qi Wang¹, Yang-Kun Qu¹, Guo-Hua Xie^{2,*}, Liang-Sheng Liao¹,
Zuo-Quan Jiang^{1,*}

¹Institute of Functional Nano & Soft Materials, Jiangsu Key Laboratory for Carbon-Based Functional Materials & Devices, Soochow University, 199 Ren'ai Road, Suzhou 215123

²Sauvage Center for Molecular Sciences, Hubei Key Lab on Organic and Polymeric Optoelectronic Materials, Department of Chemistry, Wuhan University, Wuhan 430072 China.

*Email: guohua.xie@whu.edu.cn; zqjiang@suda.edu.cn

The solubility of luminescent materials is a key parameter to improve the electroluminescent performances of solution-processed organic light-emitting diodes (OLEDs). The through-space charge transfer (TSCT) materials provide an alternative to introduce the solubilizing groups (SGs) to the linker. Herein, the tert-butyl and n-hexyl groups are introduced as SGs at C7 positions of spiro structure, named **C6-DMB** and **tBu-DMB**, away from the acceptor. This has no influence on the photophysical properties of the parent TSCT molecule. Highly efficient solution-processed OLEDs were demonstrated with the maximum external quantum efficiencies of 21.0% and 21.7%, respectively. To the best of our knowledge, these are champions in the state-of-the-art solution-processed OLEDs with TSCT emitters. This work confirmed our conjecture of constructing highly efficient soluble emitters by transforming an outstanding TSCT material from thermal evaporation to solution-processed OLEDs with SGs simply integrated on the 'bridge' linker.

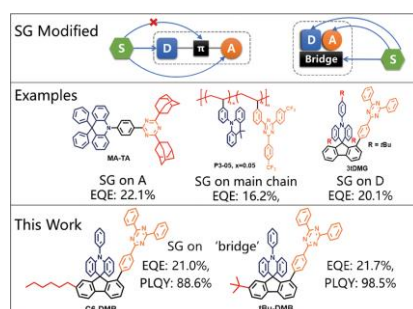


Fig. 1 Illustration for design strategy of the solubilizing groups (SG) functionalized TADF emitters

Keywords: Solution-Process; Through-Space Charge Transfer; Solubilizing Groups; TADF; OLEDs

Reference

- [1] Zheng, Q.; Wang, X.; Qu, Y; Xie, G; Liao L; Jiang, Z. *npj Flex. Electron.* **2022**, **6**, 83.
- [2] Tang, X.; Cui, L.; Li H.; Gillett, A; Auras, F; Qu, Y; Zhong, C; Jones, S; Jiang, Z; Friend, R; Liao, L. *Nat. Mater.* **2020**, **19**, 1332–1338.
- [3] Peng, C.; Yang, S; Li, H; Xie, G; Cui, L; Zou S; Poriel, C; Jiang, Z; Liao, L. *Adv. Mater.* **2020**, **32**, 48.

含梯形稠环半导体材料与器件

郑庆东^{1,*} 马云龙²

¹ 南京大学, 南京市栖霞区仙林大道 163 号, 210023

² 中国科学院福建物质结构研究所, 福州市杨桥西路 155 号, 350002

*Email: zhengqd@nju.edu.cn

梯形(Ladder-type)稠环分子通常由多个芳香环稠合获得, 具有平面性和稳定性好以及电荷传输性能优异等优点。含梯形稠环的有机半导体材料分子的稠环个数、杂原子、空间构型以及侧链位阻可直接影响着目标材料的能级、带隙、分子堆积以及电荷传输等性能。报告中我们提出利用“邻位侧链”的位阻效应来抑制梯形稠环有机光伏材料分子过度聚集的新策略, 发展了系列梯形稠环骨架上无sp³碳链的受体材料(M系列受体)。通过调控这些受体材料的分子取向及分子间弱相互作用, 提高了受体材料分子在垂直方向的电荷传输能力, 成功将A-D-A型受体材料的PCE提高到17%以上。

关键词: 梯形稠环; 分子堆积; 聚集; 有机光伏; 光电转换效率

参考文献

- [1] Y. L. Ma, D. D. Cai, S. Wan, P. S. Wang, J. Y. Wang, Q. D. Zheng, *Angew. Chem.*, **2020**, *59*: 21627.
- [2] Y. L. Ma, D. D. Cai, S. Wan, P. Yin, P. S. Wang, W. Y. Lin, Q. D. Zheng, *Nat. Sci. Rev.*, **2020**, *7*: 1886.
- [3] Y. L. Ma, M. Zhang, S. Wan, P. Yin, P. S. Wang, D. D. Cai, F. Liu, Q. D. Zheng, *Joule*, **2021**, *5*: 197.
- [4] C. Q. Tang, X. L. Ma, J. Y. Wang, X. Zhang, R. C. Liao, Y. L. Ma, P. Wang, P. S. Wang, T. Wang, F. J. Zhang, Q. D. Zheng, *Angew. Chem.*, **2021**, *60*: 19314.
- [5] Q. S. Tu, W. J. Zheng, Y. L. Ma, M. Zhang, Z. J. Li, D. D. Cai, P. Yin, J. Y. Wang, S. C. Chen, F. Liu, Q. D. Zheng, *CCS Chem.*, **2022**, *4*, doi: 10.31635/ccschem.022.202101524.
- [6] Y. L. Ma, S. X. Luan, D. D. Cai, S.-Q. Zhang, J.-Y. Wang, Q. S. Tu, Y. H. Zhu, Q. D. Zheng, *Aggregate*, **2023**, doi: 10.1002/agt2.322.
- [7] Y. L. Ma, R. Sun, Z. H. Chen, S. Zhang, D. D. Cai, S. Wan, W. Y. Lin, S.-Q. Zhang, Q. S. Tu, W. Ma, J. Min, X. T. Hao, Q. D. Zheng, *Nano Energy*, **2023**, *107*: 108116.

有机光伏 A-D-A 非富勒烯小分子受体取向的调控：端基 π - π 堆积的作用

郑文玉¹, 韩广超^{1,*}, 易院平^{1,*}

¹中国科学院化学研究所, 北京市海淀区中关村北一街2号化学所, 100190

*Email: ypyi@iccas.ac.cn

高功率转换效率是有机太阳能电池实际应用的首要前提。增强有机太阳能电池中活性层分子的水平 and face-on 取向（分子平面平行于基底表面），对改善光吸收、电荷迁移率和激子扩散率以实现高光伏效率至关重要。然而，分子自组装过程尚不清楚，有效控制分子取向仍具有挑战性。通过仿真模拟溶液法生成活性层薄膜过程，系统地研究了一系列 A-D-A 小分子受体的自组装。结果表明，在溶剂蒸发过程中，A-D-A 分子倾向于通过端基 π - π 堆积首先在液-气界面进行组装，产生水平和 face-on 取向。值得注意的是，薄膜中水平和正 face-on 取向的强度与 π - π 堆叠的数量具有良好的线性相关性。并且发现 π - π 堆积由端基 π - π 相互作用和侧链空间位阻协同控制。^[1]

关键词：有机太阳能电池；分子动力学模拟；分子自组装

参考文献

[1] Zheng, W.; Liu, J.; Guo, Y.; Han, G.; Yi, Y. *Advanced Functional Materials* **2022**, **32**: 2108551.

非共价组装体结构和发光过程的理论模拟

郑小燕^{1,*}

¹北京理工大学化学与化工学院, 北京理工大学良乡校区南区, 100081

*E-mail: xiaoyanzheng@bit.edu.cn

超分子发光材料广泛应用于能源和生命健康等领域, 这主要归因于其“自下而上”形成的层级有序的分子组装结构。其中分子间非共价弱相互作用是核心, 是分子发挥功能的基础。在分子间非共价相互作用协同驱动下, 由单体到多体的分子组装过程, 中间体结构多样, 分子组装动力学路径复杂。这赋予分子组装体多样的结构和超越于小分子之上丰富的性质与功能。另外, 超分子发光体系在生物肿瘤光学诊疗应用中潜力巨大, 但其与细胞膜相互作用及各激发态通道在肿瘤诊疗中的速率仍难以确定, 给肿瘤诊疗荧光分子设计带来挑战。近年来, 我们发展了针对分子组装过程的动力学网络模型, 并结合多尺度理论模拟解析有机分子组装体结构与发光性能关系, 并优化其生物肿瘤诊疗效率, 为实验上有机超分子发光材料的分子设计和应用开发提供理论依据。

关键词: 多尺度理论模拟, 动力学网络模型, 分子组装机制; 激发态无辐射速率

参考文献

- [1] J. Zhang, Y. J. Fang, Y. Zeng, Z. S. LI, **X. Y. Zheng***, *Mater. Chem. Front.* **2023**, accepted.
- [2] **Zheng, X.**; Chan, M. H.-Y.; Chan, A. K.-W.; Cao, S.; Ng, M.; Sheong, F. K.; Li, C.; Goonetilleke, E. C.; Lam, W. W. Y.; Lau, T.-C.; Huang, X.; Yam, V. W.-W. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **2022**, 119 (12), e2116543119.
- [3] Zhao J. Y., Zeng Y., **Zheng X.***, *Chem. Mater.* 2022, 34, 10711–10720.
- [4] **Zheng, X.**; Zhu, L.; Zeng, X.; Meng, L.; Zhang, L.; Wang, D.; Huang, X. *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, 8 (8), 1798-1803.
- [5] **Zheng, X.***; Wang, D.*; Xu, W.; Cao, S.; Peng, Q.*; Tang, B. Z.*, *Mater. Horiz.* **2019**, 6: 2016.
- [6] **Zheng, X.**; Peng, Q.; Zhu, L.; Xie, Y.; Huang, X.*; Shuai, Z.*, *Nanoscale* **2016**, 8, 15173.
- [7] Yang, J.; Peng, Q.; Xue, R.; Li, Z.; **Zheng, X.***, *Mater. Chem. Front.* **2021**, 5, 1806-1816.

半满电子态在自由基单分子电输运中的角色

郑永豪^{1*}¹电子科技大学，成都市高新西区西源大道2006号，611731

*Email: zhengyonghao@uestc.edu.cn

自由基分子由于具有独特的自旋特性受到了广泛的关注^{1,2}，而且如何利用分子的自旋特性一直是有机半导体领域的研究热点之一。自旋性质是原子尺度下物质的本征属性，在金属半导体的物理性质和有机 π -共轭分子的光电性质上具有决定性的影响。单分子电子学是研究纳米尺度下的新兴电子学方向，在研究自旋特性、运输方式以及理解分子本征性质上有着独特的优势³⁻⁵。本文主要介绍设计合成了两组苝的衍生物以及相应的自由基分子。单分子电导测试发现，自由基36-FR的单分子电导较非自由基分子36-FOH提升了800倍，然而，27-FR单分子电导仅比27-FOH提高了3倍。前者由于分子的离域半满电子轨道导致Breit-Wigner共振产生。后者则由于分子的定域SOMO轨道导致Fano共振接近费米能级。这一发现表明，单分子结中未配对电子的引入能够带来单分子电导的提升，但其提升的程度有所差别，并通过透射概率理论计算得到验证（图1）。研究结果为探究未配对电子在单分子结电输运过程中发挥的作用提供了新的思路。

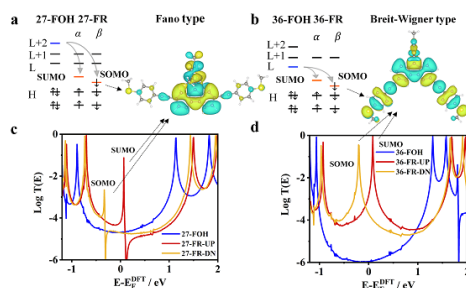


Fig. 1 (Top) Energy diagrams of 27-FR and 36-FR. (Bottom) Transmission spectra of 27-FR and 36-FR.

关键词：自由基；单分子结；电导；Fano共振；Breit-Wigner共振。

参考文献

- [1] Shen, Y.; Xue, G.; Dai, Y.; Quintero, S. M.; Chen, H.; Wang, D.; Miao, F.; Negri, F.; Zheng, Y.; Casado, J. *Nat. Commun.*, **2021**, *12*, 6262.
- [2] Miao, F.; Ji, Y.; Han, B.; Quintero, S. M.; Chen, H.; Xue, G.; Cai, L.; Casado, J.; Zheng, Y. *Chem. Sci.*, **2023**, *14*, 2698.
- [3] Liu, J.; Zhao, X.; Al-Galiby, Q.; Huang, X.; Zheng, J.; Li, R.; Huang, C.; Yang, Y.; Shi, J.; Manrique, D. Z.; Lambert, C. J.; Bryce, M. R.; Hong, W. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2017**, *56*, 13061.
- [4] Low, J. Z.; Kladnik, G.; Patera, L. L.; Sokolov, S.; Lovat, G.; Kumarasamy, E.; Repp, J.; Campos, L. M.; Cvetko, D.; Morgante, A.; Venkataraman, L. *Nano lett.*, **2019**, *19*, 2543.
- [5] Naghibi, S.; Sangtarash, S.; Kumar, V. J.; Wu, J.-Z.; Judd, M. M.; Qiao, X.; Gorenkaia, E.; Higgins, S. J.; Cox, N.; Nichols, R. J.; Sadeghi, H.; Low, P. J.; Vezzoli, A. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116985.

富勒烯聚合物在锡基钙钛矿器件中的应用

支鸿富¹, 杨成林¹, 王军方¹, 吕明升¹, 孟祥悦^{1,*}

¹中国科学院大学, 北京怀柔, 101400

*Email: mengxiangyue@ucas.ac.cn

富勒烯材料因其优异的电子传输性能, 被广泛地应用到锡基太阳能电池作为电子传输层。目前商业化的ICBA作为电子传输层为被广泛已用于锡基钙钛矿太阳能电池。但ICBA作为电子传输层的锡基钙钛矿器件活性层表面含有较多的缺陷, 且富勒烯小分子很难完全覆盖活性层表面进行电子传输。富勒烯聚合物不仅具有富勒烯分子良好的光电性能、相似的能级结构, 还能有效地解决了电子传输层与活性层接触不良的问题。我们合成了醚链与富勒烯、冠醚与富勒烯、苯丙二噻唑与富勒烯等几种富勒烯聚合物, 集中研究单体对富勒烯聚合物的能级规律, 官能团和共轭结构对富勒烯聚合物性质的影响。最后, 我们将这些富勒烯聚合物应用于锡基钙钛矿光伏器件, 探究富勒烯聚合物对其性能的影响。

关键词: 富勒烯聚合物; 富勒烯合成; 锡基钙钛矿;

参考文献

- [1] Yin, J.; Shi, X.; Wang, L.; Yan, H*.; Chen, S.; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, 61, e202210610
[2] Zuo, X.; Geng, X.; He, D.; Ding, L*. *Energy Environ. Sci.*, **2016**, 9, 2114.

基于有机场效应晶体管的柔性乳酸传感器的制备与性能研究

职丹凤, 张凤娇*

中国科学院大学化学科学学院, 北京市石景山区玉泉路 19 号甲, 100049

* Email: fjiaozhang@ucas.ac.cn

乳酸是人体新陈代谢的重要生物分子之一, 实现体液中乳酸含量的准确、快速检测对于高乳酸血症以及乳酸酸中毒的早期诊断和治疗具有重要的临床意义, 其中汗液中乳酸检测作为一种非侵入式体外检测有着广泛的应用前景。有机场效应晶体管 (Organic field effect transistors, OFETs) 是一类通过电压调控半导体导电性能的三端有源器件, 具有高柔性、良好的生物相容、低成本和可印刷制备等特性, 同时具备信号转化与信号放大等功能, 是发展可穿戴、可植入式生物电子传感器的重要载体^[1]。近年来, 基于 OFET 的生物传感器已被广泛用于离子^[2]、生物分子^[3]以及多种生物信号^[4]的检测。

为发展高灵敏度和高选择性的柔性 OFET 乳酸传感器, 我们采用氧等离子体在有机半导体表面原位接枝的方法^[5-7], 在半导体表面接枝乳酸氧化酶, 利用乳酸氧化酶和乳酸的氧化还原反应, 实现乳酸的高灵敏、选择性检测。我们进一步使用可生物降解基质材料发展柔性贴附式传感矩阵, 制备高通量检测的乳酸贴片, 为下一代柔性生物传感器提供新策略。

关键词: 有机场效应晶体管, 柔性, 乳酸传感器

参考文献

- [1] Mallory L. Hammock, Oren Knopfmacher, Benjamin D. Naab, Jeffrey B.H. Tok and Zhenan Bao, Investigation of protein detection parameters using nanofunctionalized organic field-effect transistors. *ACS Nano*, **2013**, *7*: 3970.
- [2] Daniel T. Simon, Erik O. Gabrielsson, Klas Tybrandt and Magnus Berggren, Organic bioelectronics: bridging the signaling gap between biology and technology. *Chem. Rev.*, **2016**, *116*: 13009.
- [3] Michele Sessolo, Jonathan Rivnay, Enrico Bandiello, George G. Malliaras and Henk J. Bolink, Ion-selective organic electrochemical transistors. *Adv. Mater.*, **2014**, *26*: 4803..
- [4] Peng Lin, Feng Yan, Jinjiang Yu, Helen L. W. Chan and Mo Yang, The application of organic electrochemical transistors in cell-based biosensors. *Adv. Mater.*, **2010**, *22*: 3655.
- [5] Hongguang Shen, Ye Zou, Yaping Zang, Dazhen Huang, Wenlong Jin, Chongan Di and Daoben Zhu, Molecular antenna tailored organic thin-film transistors for sensing application. *Mater. Horiz.*, **2018**, *5*: 240.
- [6] Fengjiao Zhang, Vincent Lemaure, Wookjin Choi, Prapti Kafle, Shu Seki, Jerome Cornil, David Beljonne and Ying Diao, Repurposing DNA-binding agents as H-bonded organic semiconductors. *Nat. Commun.*, **2019**, *10*: 4217.
- [7] Fengjiao Zhang, Erfan Mohammadi, Ge Qu, Xiaojuan Dai and Ying Diao, Orientation-dependent host-dopant interactions for manipulating charge transport in conjugated polymers. *Adv. Mater.*, **2020**, *32*: 2002823.

钙钛矿量子点的原位制备与集成应用研究

钟海政^{1,*}

¹北京理工大学材料学院 低维量子结构与器件工信部重点实验室

北京市海淀区中关村南大街5号, 100081

*Email: hzzhong@bit.edu.cn

量子点具有光谱可调、溶液加工等特点,是备受关注的新一代光学材料,已经在照明显示、传感探测、太阳能电池、激光等领域展现出应用前景。近年来,钙钛矿量子点的出现,为发展量子点集成应用技术提供了机遇。针对新型显示、硅基器件集成和新型光学元器件等应用需求,我们发明了钙钛矿量子点的原位制备技术,利用钙钛矿材料的溶液加工特性,通过引入聚合物或者有机分子配体控制结晶过程,在聚合物基质中直接制备出量子点,或者在ITO基片上控制形核和生长过程直接制备量子点薄膜,在此基础上开展了量子点的显示和传感应用探索。本报告将介绍实验室在这一方向取得的部分进展。

关键词: 量子点、钙钛矿、显示、探测成像

参考文献

1. Zhang, F.; Zhong, H. Z.; Chen, C.; Wu, X. G.; Hu, X. M.; Huang, H. L.; Han, J. B.; Zou, B. S.; Dong, Y. P. *ACS Nano*, **2015**, 9(4), 4533.
2. Zhou, Q. C.; Bai, Z. L.; Lv, W. G.; Wang, Y. T.; Zou, B. S.; Zhong, H. Z. *Advanced Materials*, **2016**, 28, 9163-9168 (2016)
3. Chang, S.; Bai, Z. L.; Zhong, H. Z. *Adv. Optical Mater.* **2018**, 6, 1800380.
4. Li, F.; Huang, S.; Bai, Z. L.; Liu, X. Y.; Bai, X. D.; Zhong, H. Z.* *Advanced Functional Materials*, **2021**, 31, 2008211.
5. Wang, Z. T.; Fu, R.; Xie, H. D.; He, P. W.; Sha, Q.; Tang, Z. B.; Wang, N.; Zhong, H. Z. *Advanced Functional Materials*, **2021**, 31, 2010009.
6. Han, D. B.; Imran, M.; Zhang, M.; Chang, S.; Wu, X.; Zhang, X.; Tang, J. L.; Wang, M.; Ali, S.; Li, X.; Yu, G.; Han, J. B.; Wang, L. X.; Zou, B. S.; Zhong, H. Z. *ACS Nano*, **2018**, 12(8), 8808.
7. Wang, C. H.; Han, D. B.; Wang, J. H.; Yang, Y. G.; Liu, X. Y.; Huang, S.; Zhang, X.; Chang, S.; Wu, K. F.; Zhong, H. Z. *Nature Communications* **2020**, 11, 6428
8. Zhang, X.; Han, D. B.; Wang, C. H.; Imran, M.; Zhang, F.; Ali, S.; Wang, Y. L.; Chang, S. Zhong, H. Z. *Advanced Optical Materials*, **2019**, 7, 190077.
9. Zhan, W. J., Meng, L. H.; Shao, C. D.; Wu, X. G.; Shi, K. B.; Zhong, H. Z. *ACS Photonics* **2021**, 8, 765.
10. Chen, X. B., Lu, W. G., Tang, J. L., Zhang, Y. Y., Wang, Y. T., Scholes, G. G., Zhong, H. Z. *Nature Photonics* **2021**, 15, 813-816.

含氟材料与氟碳溶剂的光电应用

钟洪亮

上海交通大学化学化工学院, 上海, 200240

*Email: hlzhong@sjtu.edu.cn

氟是电负性最强的元素, 也是原子半径最小的卤素, 被广泛引入到有机分子中, 用于调控分子的电荷分布、立体位阻、空间构象等。已有众多研究将氟原子引入共轭分子中, 利用氟原子诱导的静电吸引力锁定空间构象, 从而调节分子的平面性和材料的固态堆积。但是, 此种作用力属于非共价弱相互作用力, 受到众多因素的影响。我们研究了浓度、温度、溶剂等因素对氟原子的非共价作用力的影响规律, 探索了能够打开和关闭“构象锁”的钥匙, 实现了构象之间的实时转换, 考察了不同空间构象与光伏性能之间的关系。同时, 当分子中的大量氢原子被氟原子取代之后, 由此形成的氟碳分子具有特殊的性质, 比如低表面能、憎水憎油。利用氟碳溶剂的双疏特性, 我们发明了一种氟碳溶剂浸泡的方法, 能够在温和条件下(较低温度和较短时间)调整共混薄膜中材料的结晶、纵向分布等, 从而优化异质结微观形貌, 提升有机太阳能电池的光伏效率。

关键词: 有机太阳能电池; 含氟材料; 氟碳溶剂; 构象; 器件工程

参考文献

- [1] Zhang, Y.; Yu, C.; Shan, T.; Chen, Y.; Wang, Y.; Xie, M.; Li, T.; Yang, Z.; Zhong, H. *Cell Reports Physical Science* 2022, 100765.
- [2] Shan, T.; Zhang, Y.; Wang, Y.; Xie, Z.; Wei, Q.; Xu, J.; Zhang, M.; Wang, C.; Bao, Q.; Wang, X.; Chen, C.-C.; Huang, J.; Chen, Q.; Liu, F.; Chen, L.; Zhong, H. *Nat. Commun.* 2020, 11, 5585.

光功能分子晶体的制备与性能

钟羽武

中国科学院化学研究所，北京市中关村北一街2号，100190

Email: zhongyuwu@iccas.ac.cn

光子是一种重要的信息存储和处理的载体，除了发光强度，还可以通过其偏振信号进行记录，增加信息负载量和安全性。近年来，由于其在纳米光子学、纳米光电器件、光学传感器等领域的广泛应用前景，光功能微纳晶体的制备与性能研究受到了研究人员的广泛关注，成为光化学和光功能材料领域的前沿与热点。近期，我们以吡啶类有机小分子和金属有机配合物为基本分子组装基元，得到了形貌和发光性能可调可控的分子晶体，具有多色发光、光波导、线偏振发光、圆偏振发光、温度响应等功能，为纳米光子学奠定了重要材料基础 [1,2]。比如，常见的平面型金属有机铂化合物倾向于生成一维晶体，而图1 (Fig. 1) 展示的一类“十”字形金属有机铂配合物，可通过溶液组合法实现二维片状分子晶体的可控制备 [3]。

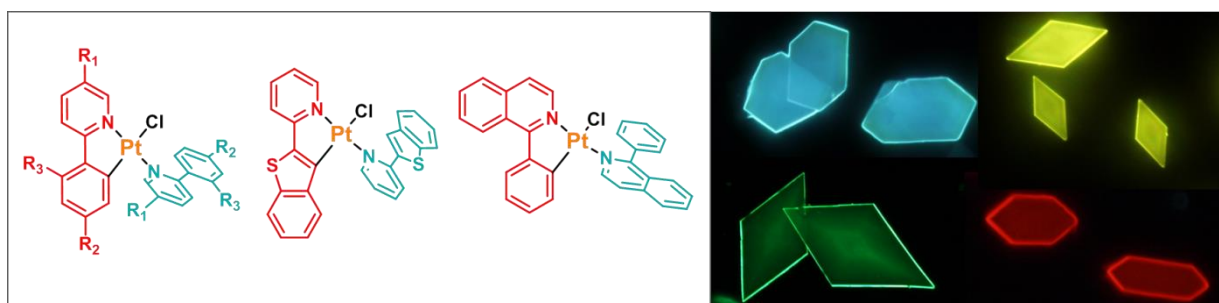


Fig. 1 Platinum complexes used for the preparations of 2D-shaped molecular crystals.

关键词：光功能微纳晶体；纳米光子学；圆偏振发光；自组装

参考文献

- [1] (a) Sun, M.-J.; Liu, Y.; Zeng, W.; Zhao, Y. S.; Zhong, Y.-W.; Yao, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 6157. (b) Zeng, W.; Sun, M.-J.; Gong, Z.-L.; Shao, J.-Y.; Zhong, Y.-W.; Yao, J. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 11316. (c) Gong, Z.-L.; Zhong, Y.-W. *Sci. China Chem.* **2021**, *64*, 788. (d) Gong, Z.-L.; Tang, K.; Zhong, Y.-W. *Inorg. Chem.* **2021**, *60*, 6607.
- [2] (a) Li, Z.-Q.; Gong, Z.-L.; Shao, J.-Y.; Yao, J.; Zhong, Y.-W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 14595. (b) Zhong, Y.-W. *Chin. J. Chem.* **2021**, *39*, 543. (c) Li, Z.-Q.; Tang, J.-H.; He, Y.-Q.; Gong, Z.-L.; Shao, J.-Y.; Zhong, Y.-W. *Cryst. Growth Des.* **2021**, *21*, 1854.
- [3] Xu, F.-F.; Zeng, W.; Sun, M.-J.; Gong, Z.-L.; Li, Z.-Q.; Y. S. Zhao, Yao, J.; Zhong, Y.-W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202116603.

钙钛矿材料的生长及光电器件

周欢萍^{1,*}

¹北京大学, 北京大学材料科学与工程学院 北京市海淀区颐和园路5号

*Email: happy_zhou@pku.edu.cn

进一步提升钙钛矿太阳能电池的光电转换效率和运行稳定性成为了促进其迈向商业化的必经之路, 而调控钙钛矿光吸收层的组分、结构/微结构、缺陷态、光电学性质以及其在使役条件下的演变是实现高效、高稳定的太阳能电池的关键。在器件效率方面, 我们探索并调控了器件在不同温度下的效率变化特性, 大幅提升器件效率, 在 220 K 下获得了 25.2% 的光电转换效率 (开压 1.23 V), 为太阳能电池在近太空中或极端严寒条件下的应用提供了依据; 与此同时, 我们在 1 cm² 面积电池上获得超过 23% 的认证效率, 小面积 (~0.1 cm²) 器件实现了 24.5% 的认证效率。在器件稳定性方面, 我们提出了“氧化还原离子对”等方法, 实现了以“可循环修复”为代表的缺陷对抑制策略, 显著延长高效率器件的光、热、电等运行稳定性; 在此基础上, 我们探讨了器件稳定化机理, 建立了钙钛矿薄膜中离子行为和相态分布与器件性能之间的相互联系, 为提高钙钛矿材料的运行稳定性而进行材料设计和加工提供了有力的指导。

关键词: 高效; 稳定; 成核生长; 微观行为; 钙钛矿太阳能电池

参考文献

- [1] Chen, Y.; Tan, S.; Li, N.; Huang, B.; Niu, X.; Li, L.; Sun, M.; Zhang, Y.; Zhang, X.; Zhu, C.; Yang, N.; Zai, H.; Wu, Y.; Ma, S.; Bai, Y.; Chen, Q.; Xiao, F.; Sun, K.; Zhou, H., *Joule*, **2020**, **4**: 1961–1976.
- [2] Li, N.; Luo, Y.; Chen, Z.; Niu, X.; Zhang, X.; Lu, J.; Kumar, R.; Jiang, J.; Liu, H.; Guo, X.; Lai, B.; Brocks, G.; Chen, Q.; Tao, S.; Fenning, P.; Zhou, H., *Joule*, **2020**, **4**: 1743–1758.
- [3] Wang, F.; Qiu, Z.; Chen, Y.; Zhang, Y.; Huang, Z.; Li, N.; Niu, X.; Zai, H.; Guo, Z.; Liu, H.; Zhou, H., *Adv. Mater.*, **2022**, 2108357.
- [4] Li, N.; Niu, X.; Li, L.; Wang, H.; Huang, Z.; Zhang, Y.; Chen, Y.; Zhang, X.; Zhu, C.; Zai, H.; Bai, Y.; Ma, S.; Liu, H.; Liu, X.; Guo, Z.; Liu, G.; Fan, R.; Chen, H.; Wang, J.; Lun, Y.; Wang, X.; Hong, J.; Xie, H.; Jakob, D.; Xu, X.; Chen, Q.; Zhou, H., *Science*, **2021**, **373**: 561–567.

溶液法光伏器件的界面研究

周惠琼^{1,*}

¹ 国家纳米科学中心, 北京中关村北一条 11 号, 100190

*Email: zhouhq@nanoctr.cn

溶液法制备的有机和钙钛矿太阳能电池, 由于具备制备成本低、柔性可弯曲、透明度较高等特点而备受关注。有机和钙钛矿太阳能电池广泛采用多层分子薄膜叠加的三明治结构。由于材料或者制备方式的限制, 器件内各种界面往往会存在一些缺陷, 比如电极与活性层无法形成欧姆接触, 活性层具有表面缺陷或者体缺陷等。这些界面问题会影响激子分离、电荷传输/收集/复合等物理过程, 进而制约了器件的性能。本报告将介绍我们在有机和钙钛矿太阳能电池界面研究的工作, 包括界面层表面能对活性层形貌调控、钝化活性层表面缺陷以及抑制活性层体缺陷等内容。

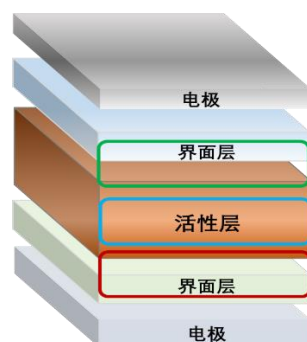


Fig. 1 Scheme of solution-based photovoltaic device structure.

关键词: 有机太阳能电池; 钙钛矿太阳能电池; 界面; 缺陷钝化; 表面能

参考文献

- [1] Y-X. Li, J-W. Ding, C. Liang, X-N. Zhang, J-Q. Zhang, D-S. Jakob, B-X. Wang, X. Li, H. hang, L-N. Li, Y-G. Yang, G-J. Zhang, X-X. Zhang, W-N. Du, X-F. Liu, Y. Zhang, Y. Zhang*, X-J. Xu, X-H. Qiu*, and H-Q. Zhou*, *Joule*, **2021**, **5(12)**: 3154-3168.
- [2] J-Q. Wang, Z. Zheng*, D-Y. Zhang, J-Q. Zhang, J-Y. Zhou, J-C. Liu, S-K. Xie, Y. Zhao, Y. Zhang, *Z-X. Wei, J-H. Hou, Z-Y. Tang, H-Q. Zhou*, *Adv. Mater.*, **2019**, **31(17)**: 1806921.

揭示全聚合物光伏电池中薄膜微观结构，力学性能和相容性之间的相关性

周康康¹，耿延侯¹，叶龙^{1,*}

¹天津大学，天津，300000

*Email: yelong@tju.edu.cn

低带隙聚合物受体的快速发展，使全聚合物太阳能电池(all-PSCs)的效率提高到18%以上。^[1-3]然而，聚合物共混薄膜作为all-PSCs光电转换的核心，其力学性能的影响和调节因素尚未得到充分的认识，阻碍了其柔性和可穿戴应用的发展。在此基础上，结合一系列表征方法，以几种代表性聚合物给体(PTzBI-Si, PTVT-T, PM6和PTQ10)和基准聚合物受体N2200为基础，研究了共混物的力学性能、相容性和薄膜微观结构，并进一步揭示了相容性-性能之间的关系。结果表明，不同组分共混物的断裂行为和弹性模量呈现不同的变化趋势，这是由共混物的分子相互作用和聚集结构所影响的。四种全聚合物共混物的弹性模量可以用从分子力学推导出的不同模型很好地预测。最重要的是，首次阐明了全聚合物共混物的相容性-形貌结构-力学性能之间的相关性。导出的关系在另一种高效混合物中(PM6: PY-IT)得到验证，将成为成功制造机械坚固和可拉伸的高效率all-PSCs的关键。

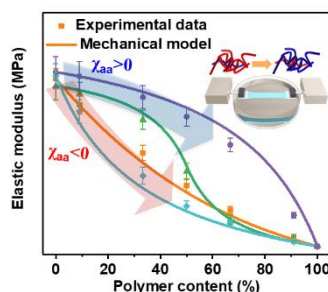


Fig. 1 Summary of mechanical models of various all-PSC active layers and the association with χ_{aa} .

关键词：全聚合物太阳能电池；可拉伸性；相容性；聚集态结构；力学性能

参考文献

- [1] Zhou K. et al., *Adv. Funct. Mater.* **2022**; **32**: 2201781.
- [2] Ma R.; Zhou K. et al. *Matter.* **2022**; **5**: 725-734.
- [3] Ma R.; Zhou K. et al. *Aggregate.* **2022**; <https://doi.org/10.1002/agt2.308>.

醇相 PEDOT 及在全印刷有机光伏电池的应用

蒋友宇, 董馨韵, 孙露露, 周印华*

华中科技大学武汉光电国家研究中心, 武汉, 430074

*Email: yh_zhou@hust.edu.cn

目前, 有机聚合物光伏电池的制备过程中通常包含溶液涂布(活性层及界面层)和真空蒸镀(金属顶电极), 这一制备过程限制了有机光伏模组的大面积、快速制备; 全印刷型(所有层均通过印刷涂布制备)可克服这一限制^[1]。基于高性能非富勒烯活性层, 要实现全印刷电池, 难点在于如何在非富勒烯活性层上表面如何制备电极, 并具备高效电荷收集能力。这是由于: (1) 给体HOMO能级深, 与高电导率PEDOT:PSS的功函失配; (2) 浸润性难以解决, 非富勒烯活性层化学活性高, 等离子处理或者表面活性剂对非富勒烯活性产生破坏。基于此, 我们开发了一种醇相PEDOT配方, 在一定程度上解决了这一问题, 并实现了全印刷型有机光伏电池^[2]。

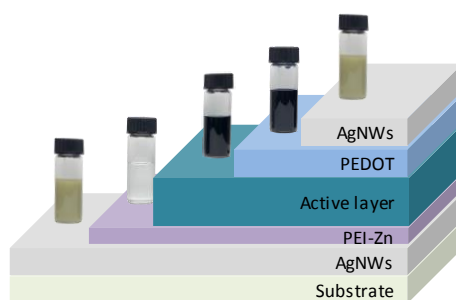


Fig. 1 Device structure of fully printable organic photovoltaics

关键词: 有机光伏; 导电高分子; 醇相PEDOT分散液; 阳极界面层; 全印刷型光伏器件

参考文献

- [1] Sun, L. L.; Zeng, W. W.; Xie, C.; Hu, L.; Dong, X. Y.; Qin, F.; Wang, W.; Liu, T. F.; Jiang, X. S.; Jiang, Y. Y.; Zhou, Y. H. *Adv. Mater.* **2020**, *32*: 1907840.
- [2] Jiang, Y. Y.; Dong, X. Y.; Sun, L. L.; Liu, T. F.; Qin, F.; Xie, C.; Jiang, P.; Hu L.; Lu, X.; Zhou, X. M.; Meng, W.; Li, N.; Brabec, C. J.; Zhou, Y. H. *Nat Energy* **2022**, *7*: 352–359.

X-XXX

高效率深蓝光晶态有机发光二极管

朱峰^{1,*}, 闫东航¹

¹中国科学院长春应用化学研究所 高分子物理与化学国家重点实验室,
人民大街 5625 号, 130022, 长春

*Email: zhufeng@ciac.ac.cn

有机晶体材料具有规则的分子排布、低的杂质含量、良好的热稳定性以及高的载流子迁移率等特点。基于有机晶体材料的晶态有机发光二极管在提高器件的光输出和稳定性方面具有潜在优势。虽然有机电致发光现象首次在有机单晶中发现, 在过去几十年OLED的发展中一直无法获得高性能的晶态发光器件。本报告介绍本课题组在发展晶态有机发光器件(新一代OLED)的系列工作, 重点介绍面向产业亟需发展的深蓝光OLED方面的进展。通过利用弱外延生长技术实现了EQE达到4.0%的深蓝光纯层晶态OLED, 进而通过建立晶态薄膜掺杂方案、调控高迁移率传输、调控发光分子纳米结构形态等方法实现了最高外量子效率(EQE)超过9%的深蓝光晶态OLED, 器件光子输出能力远高于同光色高EQE的非晶薄膜器件, 获得了具有高效率、高亮度、低驱动电压、低焦耳热损耗的新型OLED。

关键词: 晶态薄膜; 弱取向外延; OLED; 蓝光

参考文献

- [1] Liu, L.; Li, C.; Li, Z.; Sun, P.; Zhu, F.*; Wang, Y.; Yan, D. *Organic Electronics* **2020**, **84**: 105806.
- [2] Xin, J.; Sun, P.; Zhu, F.*; Wang, Y.; Yan, D. *Journal of Materials Chemistry C* **2021**, **9**: 2236.
- [3] Liu, D.; Zhu, F.*; Yan, D. *Journal of Materials Chemistry C* **2022**, **10**: 2663.

有机热电转换过程的输运机制与性能预测

朱嘉^{1,*}, 魏瑜^{2,1}, 郝伟^{1,3}, 赵虎⁴, 李述周³

¹ 国家纳米科学中心, 北京 100190

² 北京师范大学化学学院, 理论及光化学教育部重点实验室, 北京 100875

³ *School of Materials Science and Engineering, Nanyang Technological University, 50 Nanyang Avenue, 639798, Singapore*

⁴ 北京师范大学物理系, 北京 100875

*Email: zhujia@nanoctr.cn

近年来新型有机热电转换材料的研究逐渐成为有机分子器件发展的新热点。尽管高电导和低热导的有机材料理论上具有高热电转换效率,但由于有机分子结构、电子结构以及聚集态的复杂性,从而使有机热电转换过程的关键物理量间存在更加复杂的相互制约现象,影响着进一步有机热电材料的发展和认识。以有机小分子为主体的 D-A 型电荷转移复合物具有规则有序分子聚集态结构,同时它也具备高电导率性能的潜力,可以作为理想的研究热电输运过程和机制的理想体系。本研究采用第一性原理计算,应用 Boltzmann 输运理论和形变势理论,针对非掺杂条件下的多种分子结构调控及其聚集态情况,研究 D-A 型电荷转移复合结构的电输运机制和 Seebeck 值变化,并预测其热电转换效率。该研究深入揭示了热电转换过程中关键参数间的相互制约关系,进一步对突破热电参数的制约提出了相应的理论认识。

Fig. 1 The β' -phase based on (5-CNB-EDT-TTF)₄I₃ exhibits a simultaneously increased Seebeck coefficient and excellent electrical conductivity.

关键词: 有机热电材料; 输运机制; 热电转换; 电导率; Seebeck系数

参考文献

[1] Wang, Y; Zhao, M., Zhao, H. ; Li, S ; Zhu, J and Fang, W. *J. Mater. Chem A*. 2022, 10: 4288

多卤策略用于平衡双极性晶体管及高增益反相器

朱明亮^{1,2}, 杨杰¹, 郭云龙^{1,2*}, 刘云圻^{1,2*}

¹, 中国科学院化学研究所, 100190

² 中国科学院大学, 北京, 100049

*Email: zhumingliang@iccas.ac.cn

与无机半导体相比, 可溶液法加工的双极性聚合物是 CMOS 工艺强有力的支撑材料。双极性聚合物作为类 CMOS 电路中的单组分半导体, 具有柔性、低成本、易于大面积加工的优势。在实际应用中, 类 CMOS 电路有望采用具有高增益和良好噪声容限的双极性场效应晶体管反相器。在此, 我们提出了一种多卤化策略, 并合成了多卤化 BAI 受体 (FCIBAI-2T) 和相应的共轭聚合物 PFCIBAI-V。它的 E_g 为 0.99 eV, HOMO/LUMO 能级为 -5.40/-3.86 eV, 表现出的窄带隙使其能够在晶体管中实现良好平衡的双极性载流子运输。该器件实现了 1.72 和 1.22 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 的平衡空穴和电子运输, 这是 BAI 基聚合物的最佳值之一。此外, 基于 PFCIBAI-V 的反相器表现出高增益和良好的噪声容限, 而基于 PBAI-V 的器件表现出非理想且不平衡的双极性载流子运输, 并且对于反相器表现出低增益。所有结果表明, 多卤化是实现高性能双极性晶体管和反相器的有效策略, 有望应用于其它有机电子学领域。

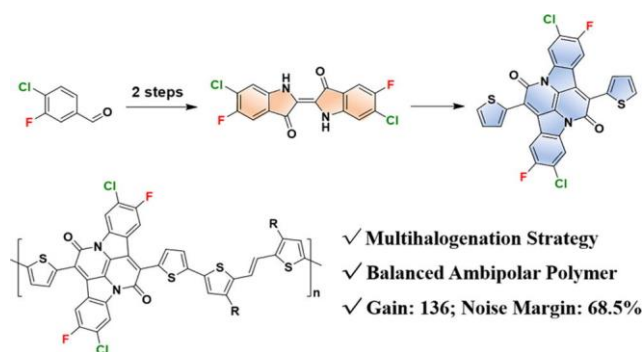


Fig. 1 A multihalogenation strategy for ambipolar transistors and high-gain inverters with good noise margin

关键词: 多卤代策略; 高迁移率; 双极性; 聚合物场效应晶体管

参考文献

[1] Jie Yang, Xueli Yang, Jinyang Chen, Zhiyuan Zhao, Yaqian Jiang, Mingliang Zhu, Junyu Li, Kai Chi, Shuai Wang, Yunlong Guo, Yunqi Liu. *Science Bulletin* **2022**, *67*: 30.

微量卤化铵辅助优化策略提升钙钛矿太阳能电池光伏性能

朱瑞^{1,*}

¹ 北京大学, 北京市海淀区成府路 209 号北京大学物理学院西 433, 100871

*Email: iamzhurui@pku.edu.cn

有机卤化铵如甲基卤化铵、卤化甲脞和其它烷基卤化铵, 在钙钛矿太阳能电池中起着关键作用。一方面, 它们是构建二维或三维钙钛矿晶体不可缺少的组成部分, 可调节钙钛矿的带隙; 另一方面, 微量卤化铵可以作为掺杂剂或添加剂来改善钙钛矿薄膜, 主要涉及三类: (i) 钙钛矿前驱体溶液的优化; (ii) 钙钛矿薄膜表面的后处理; (iii) 钙钛矿埋底界面的修饰, 这一方面可总结为“微量卤化铵辅助优化策略”。

我的课题组从2015年开始关注该策略提升钙钛矿太阳能电池光伏性能的研究, 并取得系列创新成果, 例如: 在醋酸铅基钙钛矿前驱体溶液中掺杂甲基溴化铵以调节结晶, 增强钙钛矿薄膜光电性能 (专利 ZL 2015 1 0930985.2); 发展“溴化胍辅助二次生长”的薄膜优化方法, 有效抑制非辐射复合损失, 提升器件开路电压; 优选含小分子卤化铵和共轭聚合物卤化铵电解质的二元混合体系, 协同调控反式结构电池中钙钛矿薄膜埋底界面和晶体生长。以上结果均为钙钛矿太阳能电池效率和稳定性的提升给予一定的参考。

关键词: 钙钛矿太阳能电池; 微量卤化铵; 辅助优化; 光伏性能提升

参考文献

- [1] *Adv. Funct. Mater.* **2016**, **26**: 3508.
- [2] *Science* **2018**, **360**: 1442.
- [3] *Energy Environ. Sci.* **2021**, **14**: 6526.
- [4] *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, **144**: 1700.
- [5] *Adv. Mater.* **2021**, **33**: 2006435.
- [6] *Adv. Mater.* **2023**, **35**: 2206345.

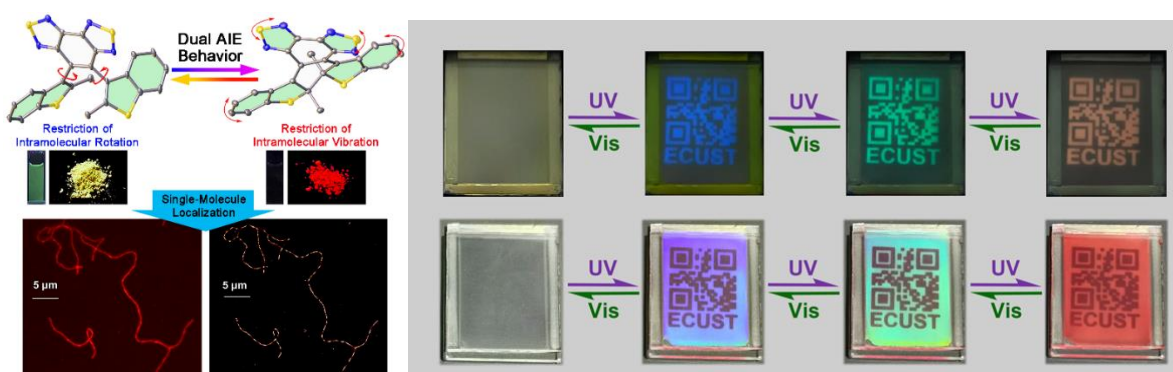
光敏材料与光控超结构

朱为宏

华东理工大学，精细化工研究所，上海市梅陇 130 号，邮编 200237

*E-mail: whzhu@ecust.edu.cn

构造人工光控手性超分子体系一直是材料化学和超分子化学中最吸引人的话题。然而，由于缺少合适的组装砌块一直是一大挑战。主要介绍苯并二噻二唑位阻型烯桥光敏材料体系，重点放在双稳态、构象异构体及手性异构体的分离等性能的突破。介绍该位阻型烯桥的超分子手性金属配位大环构筑、光控协同反应和手性专一性可逆调控，以及在液晶体系的光控超结构调控、防伪技术中的应用。



关键词：光响应；光致变色单元；手性专一性调控；协同效应；防伪技术

参考文献

- [1] Zheng, Z. G.; Hu, H. L.; Zhang, Z. P.; Liu, B. H.; Li, M. Q.; Qu, D. H.; Tian, H.; Zhu, W. H., Feringa, B. L., *Nature Photonics*, 2022, **16**, <https://doi.org/10.1038/s41566-022-00957-5>; Hu, H. L.; Liu, N. H.; Li, M. Q.; Zheng, Z. G., Zhu, W. H., *Adv. Mater.*, 2022, **34**, 2110170.
- [2] Li, M. Q.; Chen, L. J.; Cai, Y. S.; Luo, Q. F.; Li, W. L.; Yang, H. B.; Tian, H.; Zhu, W. H. *Chem* 2019, **5**, 634–648; Li, M. Q.; Chen, L. J.; Zhang, Z. P.; Luo, Q. F.; Yang, H. B.; Tian, H.; Zhu, W. H. *Chem. Sci.* 2019, **10**, 4896–4904.
- [3] Xi, H. C.; Zhang, Z. P.; Zhang, W. W.; Li, M. Q.; Lian, C.; Luo, Q. F.; Tian, H.; Zhu, W. H. *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, **141**, 18467–18474; Li, W. L.; Jiao, C. H.; Li, X.; Xie, Y. S.; Nakatani, K.; Tian, H.; Zhu, W. H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2014, **53**, 4603–4607.
- [4] Yang, H.; Li, M. Q.; Li, C.; Luo, Q. F.; Zhu, M. Q.; Tian, H.; Zhu, W. H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, **59**, 8560–8570.
- [5] Cai, Y. S.; Guo, Z. Q.; Chen, J. M.; Li, W. L.; Zhong, L. N.; Gao, Y.; Jiang, L.; Chi, L. F.; Tian, H.; Zhu, W. H. *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, **138**, 2219–2224.

高效有机光伏给体材料的分子设计与性能调控

夏浩, 彭文红, 唐炜, 孙大伟, 朱梦冰, 张斌, 谭华, 刘煜, 朱卫国*

常州大学材料科学与工程学院, 江苏省光电热能转换材料与应用工程实验室, 江苏省光伏科学与工程协同创新中心, 材料科学与工程国家实验教学示范中心, 常州 213164

*Email: zhuwg18@126.com

有机太阳能电池(OSCs)研究目前已取得显著的进展, 单节电池最高效率已超过19%^[1]。但是, 高效给体材料的种类仍然偏少, 材料分子结构与性能之间的关系并未完全清晰, 开发高性能的给体材料, 揭示结构与性能之间的关系, 对推动OSCs实现商业化具有重要意义。我们采取D-A嵌入、骨架异构、不对称响应、侧基增大等策略, 发展了A₁-D-A-D-A₁型小分子给体材料、(D-A)₂D和(A-D)₂A型齐聚物给体材料, 以及多元共聚聚合物给体材料^[2-5], 系统研究了分子结构与光物理、电化学、结晶性、光伏等性能的关系, 获得了效率超过17%的绿色溶剂加工、低能损、高稳定性的OSCs器件。研究为深入理解三元OSCs能损机制和活性层形貌调控规律提供了新的认识, 对开发高效稳定的光伏给体材料及其器件具有重要的指导意义。

关键词: 小分子; 齐聚物; 聚合物; 供体材料; 有机太阳能电池

致谢

感谢国家自然科学基金面上项目(52073035)、高分子材料科学与工程国家特色专业(TAPP)、江苏省研究生科研创新项目(KYCX20_2513)、江苏省优势学科三期建设项目(PAPD)、江苏省双创人才项目对本研究的支持。

参考文献

1. Y. Cui, Y. Xu, H. Yao, P. Bi, L. Hong, J. Zhang, Y. Zu, T. Zhang, J. Qin, J. Ren, Z. Chen, C. He, X. Hao, Z. Wei, J. Hou, *Advanced Materials*, **2021**, 2102420.
2. H. Xia, Y. Zhang, W. Y. Deng, K. Liu, X. X. Xia, C.-J. Su, U.-S. Jeng, M. Zhang, J. M. Huang, J. W. Huang, C. Q. Yan, W.-Y. Wong, X. H. Lu, W. G. Zhu*, G. Li*. *Advanced Materials*, **2022**, DOI: 10.1002/adma.2021 07659.
3. W. H. Peng, Y. B. Lin*, S. Y. Jeong, Z. Genene, A. Magomedov, H. Y. Woo, C. L. Chen, W. Wahyudi, Q. Tao, J. Y. Deng, Y. Han, V. Getautis, W. G. Zhu*, T. D. Anthopoulos*, E. G. Wang*. *Nano Energy*, **2022**, 92, 106681.
4. W. H. Peng, Y. B. Lin*, S. Y. Jeong, Y. Firdaus, Z. Genene, A. Nikitaras, L. Tsetseris, H. Y. Woo, W. G. Zhu*, T. D. Anthopoulos*, E. G. Wang*. *Chemistry of Materials*, **2021**, 33, 7254–7262.
5. W. Tang, W. H. Peng, M. B. Zhu, H. X. Jiang, W. C. Wang, H. Xia, R. Q. Yang, O. Inganäs, H. Tan*, Q. Z. Bian*, E. G. Wang*, Weiguo Zhu*. *Journal of Materials Chemistry A*, **2021**, 9, 20493- 20501.

1,10-菲咯啉衍生物的合成制备及其在光电器件中的应用

朱旭辉

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室, 广州市, 510640

*Email: xuhuizhu@scut.edu.cn

1,10-菲咯啉(1,10-phenanthroline)是一类兼具缺电子和强螯合能力的结构单元, 其衍生物BCP (bathocuproine, 浴铜灵)、BPhen(bathophenanthroline, 红菲咯啉)早期广泛地应用于有机发光二极管和光伏器件的阴极界面层或电子传输层。BCP易结晶, BPhen的玻璃化转变温度低($T_g \approx 66^\circ\text{C}$), 因而不利于二者器件的稳定性。近年来, 我们发展了系列高 T_g 菲咯啉化合物, 重点关注其合成及其在OLEDs、有机和杂化光伏与叠层器件中的性能研究。^[1-7]

关键词: 菲咯啉; 界面修饰; 电子传输; 光电器件; 叠层器件

参考文献

- [1] Tan, W.-Y.; Wang, R.; Li, M.; Liu, G.; Chen, P.; Li, X.-C.; Lu, S.-M.; Zhu, H. L.; Peng, Q.-M.; Zhu, X.-H.; Chen, W.; Choy, W. C. H.; Li, F.; Peng, J.B.; Cao, Y. *Adv. Funct. Mater.* **2014**, 24: 6540.
- [2] Jin, G.; Liu, J.-Z.; Zou, J.-H.; Huang, X.-L.; He, M.-J.; Peng, L.; Chen, L.-L.; Zhu, X.-H.; Peng, J.B.; Cao, Y. *Sci. Bull.* **2018**, 63: 446.
- [3] (a) Wang, K.; Neophytou, M.; Aydin, E.; Wang, M.; Laurent, T.; Harrison, G. T.; Liu, J.; Liu, W.; De Bastiani, M.; Khan, J. I.; Anthopoulos, T. D.; Laquai, F.; De Wolf, S. *Adv. Mater. Interfaces* **2019**, 6, 1900434. (b) Seitkhan, A.; Neophytou, M.; Kirkus, M.; Abou-Hamad, E.; Hedhili, M. N.; Yengel, E.; Firdaus, Y.; Faber, H.; Lin, Y.; Tsetseris, L.; McCulloch, I.; Anthopoulos, T. D. *Adv. Funct. Mater.* **2019**, 29: 1905810.
- [4] Xu, W.-Z.; Gao, Y.; Ming, W.-J.; He, F.; Li, J.-Z.; Zhu, X.-H.; Kang, F.-Y.; Li, J.-Y.; Wei, G.-D. *Adv. Mater.* **2020**, 32: 2003965.
- [5] Li, Y.-H.; Wu, X.; Zuo, G.-Z.; Wang, Y.-F.; Liu, X.-J.; Ma, Y.-X.; Li, B.-L.; Zhu, X.-H.; Wu, H.-B.; Qing, J.; Hou, L.-T.; Cai, W.-Z. *Adv. Funct. Mater.* **2023**, 33: 2209728.
- [6] Zhu, X.-H.; Zhang, J.; Zhang, X.-C.; Kang, J.-Y.; Zeng, M.-M.; Li, N.-Q. CN202211692535.0 [P], *Appl.* Date: 28 Dec **2022**.
- [7] Chen, L.-L.; Tan, W.-Y.; Zhu, X.-H. *Sci. Bull.* **2020**, 65: 2033.

Application of organic field-effect transistor in memory

Zhiheng Zhu (朱志恒)¹, Yunlong Guo^{1,2*}, and Yunqi Liu^{1,2}

¹Beijing National Laboratory for Molecular Science, Key Laboratory of Organic Solids, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Science, Beijing 100190, P.R.China.

²Department of Chemistry, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, P.R. China

E-mail: guoyunlong@iccas.ac.cn

Organic semiconductors for electronic devices have attracted much attention in scientific research and industrial applications. In the past few decades, functional organic field-effect transistors (OFETs) have developed rapidly, especially OFETs with memory function. Here, through a detailed introduction of the background, memory mechanism and structure construction, we make a comprehensive summary of memory application based on OFETs. Further, we describe four types of OFET memories, i.e. floating-gate OFET memory, electret OFET memory, ferroelectric OFET memory, and optoelectronic OFET memory. Finally, We put forward challenges on the development of OFET memory and look forward to the future trend of the development of OFET memory.

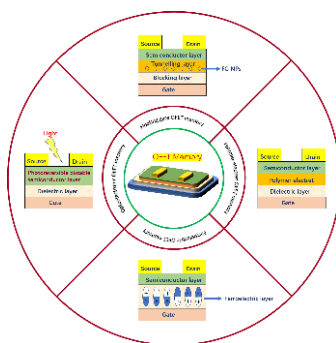


Fig. 1 Organic transistor memory

Keywords: memory, transistor, electret

Reference

[1] Z. Zhu, Y. Guo, Y. Liu, *Materials Chemistry Frontiers* 2020, 4, 2845.

尺寸匹配的二羧酸分子修饰钙钛矿太阳能电池的埋底界面

庄旭晖¹, 马东羽¹, 章自寿^{1,*}, 赵娟^{1,*}, 池振国^{1,*}

¹中山大学, 广州市番禺区小谷围街道大学城外环东路 132 号, 510006

*Email: chizhg@mail.sysu.edu.cn

二羧酸分子能够同时钝化 SnO₂ 表面多个缺陷位点, 在钙钛矿太阳能电池的埋底界面修饰方面具有良好的应用前景。先前研究表明相似分子结构的添加剂的钝化作用可能存在显著差异, 因此分子链长度或将影响二羧酸分子与 SnO₂ 表面的相互作用。本文通过不同烷基链长度的二羧酸分子, 包括乙二酸 (OA)、丙二酸 (PA) 和丁二酸 (SA), 来修饰钙钛矿太阳能电池的埋底界面。密度泛函理论计算表明, OA 分子的两端羧基间距与 SnO₂ 晶胞尺寸匹配良好, 因此 OA 的两个羧基都能与 SnO₂ 表面缺陷位点结合, 而 PA 与 SA 只有单个羧基能发生作用。基于此, OA 修饰后器件光电转换效率达到 22.91%, 优于未修饰器件的 21.20%。同时, OA 修饰后钙钛矿太阳能电池的具有更好的稳定性, 在大气环境下放置 1100 小时后仍可保持 80% 以上的效率, 而未修饰器件只能保持初始效率的 65%。

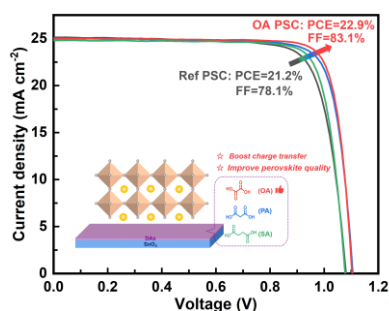


Fig. 1 Schematic diagram of dicarboxylic acid for buried interfacial engineering and the J - V curves of champion devices.

关键词: 钙钛矿太阳能电池; 界面修饰; 二羧酸分子

参考文献

[1] Zhuang, X.; Ma, D.; Li, G.; Yang, Z.; Zhang, Z.; Zhao, J.; Chi, Z. *Chemical Engineering Journal*. **2023**, **460**: 141705.

钙钛矿材料的固相合成及高质量钙钛矿薄膜的磁控溅射沉积

邹德春

¹ 北京大学化学与分子工程学院, 北京市海淀区成府路 292 号, 100871

*Email: dczou@pku.edu.cn

摘要: 得益于钙钛矿材料优异的光伏特性, 钙钛矿太阳能电池经过十余年的发展其光电转化效率便逼近晶硅电池¹。目前主流的溶液法在实验室中可以获得较高的器件效率, 然而钙钛矿材料的结晶过程不易控制, 动力学、热力学问题尚不明确。这些问题极大地限制了钙钛矿太阳能电池在工业中的实际应用。针对上述问题, 本课题组从全新的角度出发, 摒弃有机溶剂的使用, 直接将钙钛矿所需的原料混合球磨, 通过调整原料组分与球磨条件, 实现组分精准可调的钙钛矿材料的固相合成²; 进一步使用固相合成的钙钛矿粉末压制靶材, 直接通过磁控溅射制备获得高质量的钙钛矿薄膜, 通过深入探究磁控溅射的过程与机理, 精准调控磁控溅射的条件与后处理工艺, 最终实现高效率钙钛矿太阳能电池的制备³。本工作为钙钛矿材料的基础研究提供了一种全新的思路, 同时也为推进钙钛矿太阳能电池的工业化提供了一条可行的工艺路线。

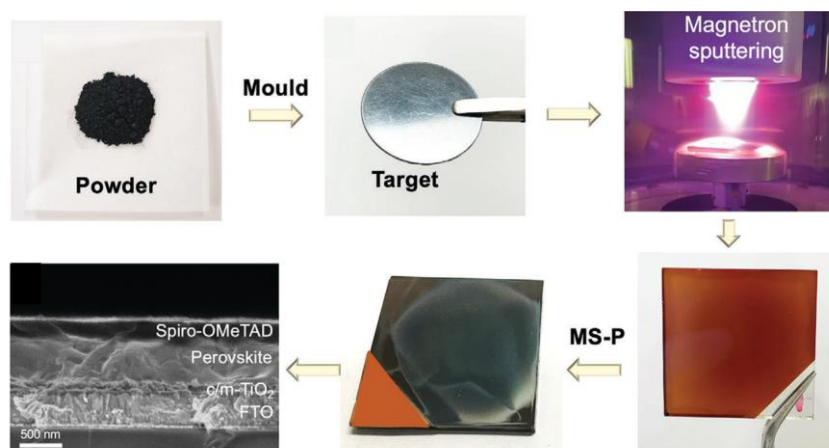


Fig. 1 Fabrication process of perovskite solar cells prepared by magnetron sputtering.

关键词: 钙钛矿; 固相合成; 磁控溅射

参考文献

- (1) Park, J.; Kim, J.; Yun, H.-S.; Paik, M. J.; Noh, E.; Mun, H. J.; Kim, M. G.; Shin, T. J.; Seok, S. I. Controlled growth of perovskite layers with volatile alkylammonium chlorides. *Nature* **2023**.
- (2) Tang, S.; Xiao, X.; Hu, J.; Gao, B.; Chen, H.; Peng, Z.; Wen, J.; Era, M.; Zou, D. Solvent-free mechanochemical synthesis of a systematic series of pure-phase mixed-halide perovskites $\text{MAPb}(\text{I}_x\text{Br}_{1-x})_3$ and $\text{MAPb}(\text{Br}_x\text{Cl}_{1-x})_3$ for continuous composition and band-gap tuning. *Chempluschem* **2020**, *85*, 240-246.
- (3) Gao, B.; Hu, J.; Tang, S.; Xiao, X.; Chen, H.; Zuo, Z.; Qi, Q.; Peng, Z.; Wen, J.; Zou, D. Organic-inorganic perovskite films and efficient planar heterojunction solar cells by magnetron sputtering. *Adv Sci (Weinh)* **2021**, *8*, e2102081.



**主办单位：中国科学院化学研究所
中国科学院大学**

**承办单位：中国科学院大学材料科学与光电技术学院
中国科学院大学魏桥国科联合实验室**