

ITIC struktūras pārveide uz D-A-D and A'-D-A-D-A' tipa nefullerēnu akseptoriem organisko saules elementu pielietojumam

Kirills Dmitrijevs¹, Kaspars Taskovskis¹, Raitis Gržibovskis²

¹*Rīgas Tehniskās universitātes Kīmijas un kīmijas tehnoloģijas institūts*

²*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Pēdējā laikā heteropārejas (BHJs) organiskie saules elementi (OSC) ir piesaistījuši lielu uzmanību, galvenokārt pateicoties nefullerēnu akseptoru (NFA) atklāšanai. Jaunajai pieejai ir perspektīva sekmēt lētu atjaunojamu enerģijas avotu izstrādi, pateicoties samazinātām ražošanām izmaksām, pielietojot šķīdumu uznešanas vai drukāšanas metodes.

Šajā darbā autori maina ierasto A-D-A tipa NFA struktūru uz D-A-D un A'-D-A-D-A', kur akseptora fragments (A) būtu 1,2-di(dicianometilēn)-3,7-diokso-1,2,3,4,5,6,7-heksahidro-s-indacēns. Savukārt, kā donora (D) fragments tiek izmantoti, attiecīgi, indēnotieno[3,2-b]tiofēna un indacēnoditieno[3,2-b]tiofēna strukturālie atvasinājumi. Šādā veidā tiek sasniegta alternatīvā molekulu pakāšanas kārtība, kur virzošais spēks cietās fāzes pakāšanās kārtībai būtu akseptora fragments. Potenciāli šī izmaiņa pozitīvi ietekmēs iegūto NFA elektroniskās īpašības, uzlabojot elektronu mobilitāti. Lai testētu šo pieeju, tika sintezēti ITIC tipa hromofori ar D-A-D un A'-D-A-D-A' struktūrām. Iegūto D-A-D molekulāro akseptoru absorbcijas profili ir līdzīgi standartvielai ITIC, tomēr A'-D-A-D-A' hromoforam tika novēroti divi absorbcijas maksimumi ar lielu bathochromu nobīdi relatīvi pret ITIC.

Autori pateicas LZP projektam Izp-2022/1-0494 par finansiālu atbalstu pētniecībā.

ITIC structure conversion to D-A-D and A'-D-A-D-A' type non-fullerene acceptors for organic solar cell application

Kirills Dmitrijevs¹, Kaspars Taskovskis¹, Raitis Gržibovskis²

¹*Institute of Chemistry and Chemical technology, Riga Technical University*

²*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

Bulk heterojunction (BHJs) organic solar cells (OSCs) have attracted much attention recently, primarily driven by the incorporation of novel non-fullerene acceptors (NFAs) in OSCs devices. The new approach has perspective to achieve cheap renewable energy due to reduced manufacturing costs by employing such production methods as solution processing or inkjet printing.

In this work authors change common A-D-A type NFA architecture to D-A-D and A'-D-A-D-A', wherein A would be 1,5-bis(dicyanomethylene)-3,7-dioxo-1,2,3,5,6,7-hexahydro-s-indacene. Structural derivatives of indenothieno[3,2-b]thiophene and indacenedithieno[3,2-b]thiophene are used as the donor (D) fragment, respectively. In this way alternative molecular stacking arrangements would be achieved, where driving force of stacking would be the acceptor fragment. Potentially this would positively change electronic properties of NFAs by enchanting charge mobilities. As a proof of concept, ITIC type chromophores with D-A-D and A'-D-A-D-A' type structures were synthesized. The absorption profiles of the obtained D-A-D small molecular acceptors are similar to the standard ITIC, however, for the A'-D-A-D-A' chromophore, two absorption peaks with a large bathochromic shift relative to ITIC were observed.

The financial support of Latvian Scientific Council project Izp-2022/1-0494 is greatly acknowledged.