

D05. 功能分子材料与器件

分会主席：刘云圻、胡文平、王贤保

D05-01

有机激光材料进展

马於光

华南理工大学发光材料与器件国家重点实验室

发展新型的增益材料一直是有机激光领域中的重要课题，也是实现有机电泵激光的重要途径。目前国内外学者研究较多的有机增益介质除传统的共轭聚合物[1]和有机小分子晶体外，还出现一些利用其他光化学途径来实现受激辐射的增益材料。有机玻璃态小分子是一类室温下处于玻璃态的无定型材料，具有确定的分子构型、光电性质各项同性、可溶液加工和复现性好等特点，在有机发光二极管（OLED）中得到了广泛应用，但该类材料用于有机激光的研究并不多见。

本文将报道一种有机玻璃态小分子材料 OCBzC 的受激辐射特性。利用溶液加工的方法制备出的薄膜可以很容易地观察到放大自发辐射（ASE）现象，并获得 1.9 cm^{-1} 的低损耗系数。瞬态吸收光谱的结果表明，OCBzC 材料的低损耗系数可能归功于分子间电荷物种吸收峰的缺失。通过建立激发态的动力学模型可知，与 ASE 现象相关的单线态激子其动力学行为在 ASE 阈值前后产生巨大差异，激子辐射寿命显著降低。利用该模型拟合得到的 ASE 速率常数 Γ 与 ASE 峰的光强变化相一致，表明该模型能够准确描述 OCBzC 材料的受激辐射特性。结合以上分析，我们发现 OCBzC 具有良好的放大自发辐射性能及独特的光物理性质，能让我们对有机激光材料的设计有更深刻的认识。

D05-02

高效寡聚物 ADA 型有机光伏材料及器件研究

陈永胜

南开大学化学学院

Polymer/organic photovoltaic has been thought as one of the promising technology to face the increasing energy and environmental issues. In this talk, the design and fabrication of a series of high performance oligomer-like organic small molecules and their OPV devices with >14 PCEs will be discussed.

D05-03

Giant photoelectric-gating effect for highly-sensitive photodetectors based on epitaxial organic/tungsten diselenide heterostructure

魏大程

复旦大学

Photo-gating or photoelectric-gating modulation is regarded as a promising strategy for achieving high performance photodetectors, which amplifies photoresponsivity by long-lived trapped charges at the interface. However, further improving the performance is limited by the uncontrollable charge trapping process. Here, we develop a new strategy, named giant photoelectric-gating, which enhances the charge trapping process by the synergy of photo-gating and electric-gating effects, at the interface with an electric-gating tunable energy barrier. By this strategy, responsivity and detectivity of 1,4-bis(4-methylstyryl) benzene/WSe₂ increase by 25-fold and 3-fold to $3.6 \times 10^6 \text{ A/W}$ and $8.6 \times 10^{14} \text{ Jones}$, which are among the highest values for heterostructure photodetectors. As an application, an electric-gating switchable photodetector has been developed, showing great potential of this strategy not only in high performance photodetectors, but also in new types of photoelectrical devices.

D05-04

功能性分子自旋电子器件

孙向南

国家纳米科学中心

分子半导体由于具有较弱的自旋轨道耦合作用而被认为是最具潜力实现高效自旋运输的材料之一。然而，目前多数报道

中分子半导体材料中的自旋输运距离仍然十分有限,尤其是在室温条件下。另外,由于较弱的自旋轨道耦合作用,分子半导体材料中电子的自旋对外磁场的响应能力弱,难以实现高效的自旋操控。我们在研究中利用浴铜灵(BCP)分子材料构筑自旋阀器件,通过对自旋输运机制的研究,证明了自旋电荷在有机层中的输运过程(室温输运距离>60 nm)(X. Sun et al. Nat. Commun.2013, 4: 2794.)。之后,我们又基于全氟酞菁铜分子材料(F16CuPc)进一步探索有机自旋阀器件的性能优化和功能应用。我们通过研发低温制备工艺,制备了性能可靠的有机自旋阀器件,并实现了目前报道中最高的室温自旋输运距离(>180 nm)(X. Sun et al. Adv. Mater. 2016, 28: 2609.)。另外,我们在单个器件中成功实现了光、磁双重响应功能集成,为功能性自旋器件的实现建立了极具前景的平台。最近,我们在上述研究的基础上成功研发了具有全新器件功能的自旋分子光伏器件,在这一器件中首次实现了室温下接近100%自旋极化光生电流/电压的可控输出,并且通过材料的光伏效应,初步在分子半导体器件中实现了自旋输出信号的操控。(X. Sun et al. Science 2017, 357: 677.)

关键词: 分子自旋电子学, 分子自旋阀, 自旋输运, 自旋操控, 分子自旋光伏器件

D05-05

有机和高分子高迁移率材料

耿延候¹, 田洪坤¹, 邓云峰², 高垚¹, 何克强², 郭恺¹

1.天津大学材料科学与工程学院

2.中国科学院长春应用化学研究所

相对于p型高分子材料,n型高分子材料比较少。针对这一问题,我们提出在重复单元中引入多个F原子,同步降低聚合物的LUMO和HOMO能级的n型共轭聚合物设计概念,合成了系列基于吡咯并吡咯二酮(DPP)衍生物或异靛蓝衍生物与噻吩衍生物的共轭聚合物,通过制备薄膜晶体管(OTFT)器件,研究了它们的半导体性质。发现这些聚合物均具有较低的LUMO能级,依据HOMO能级的高低,它们表现出双极和n型OTFT传输特性。此外,这些聚合物均可采用原子经济型合成方法、即直接芳基化缩聚高效合成。

高迁移率半导体材料的OTFT性质不仅和分子本身的性质有关,还和多晶薄膜的形貌相关。大面积连续、晶界少的薄膜是获得优异OTFT性质的重要前提之一。有鉴于此,我们基于芳香稠环单元BTBT,设计与合成了系列具有高有序液晶相的非对称共轭分子,发现具有双层结晶生长模式的分子在真空蒸镀过程中倾向于采取二维生长模式,可以获得大面积均匀薄膜。基于这类薄膜制备了空穴迁移率最高可达 $10.5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的OTFT器件,且迁移率的栅压依赖性很低。

关键词: 有机半导体, 有机薄膜晶体管, 迁移率

D05-06

新型太阳能电池共聚单元构筑及界面工程

陈义旺

南昌大学

有机太阳能电池活性层光谱吸收、分子聚集尺寸、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,而活性层晶粒尺寸与晶界连接以及缓冲层界面致密性是提高钙钛矿电池的稳定性关键。发展可水/醇溶液加工和可拉伸耐弯曲柔性界面纳米材料以及碳基或银网格非铟透明电极是解决有机或钙钛矿太阳能电池应用的关键,解决活性层和界面层的可印刷加工性以及加工过程中相形态变化是有机或钙钛矿太阳能电池商业化的关键。本研究围绕聚合物太阳能电池分子精准设计、溶液加工和可打印性,钙钛矿太阳能电池晶界缺陷、溶液加工和可印刷性,金属网格透明电极等开展研究。发展了无规共聚精准引入第三单元,可以切实有效调控有机聚合物太阳能电池给体和受体的聚集行为、能级结构以及吸收系数,实现全聚合太阳能电池器件各项参数,包括开路电压、短路电流和填充因子显著提升。提出了D-A-p和D-s-A非对称,有效保证了聚合物共轭主链的平面性,精准调控了给体聚合物的能级结构,降低分子主链的扭转角并保持器件的高开路电压进而实现了高效的器件性能,并适用于非卤加工。通过螯状稠环富电子核结构大大扩大了非富勒烯受体的光学响应范围,精准调控了受体能级结构和分子内电荷转移以及分子间p-p堆砌行为。

关键词: 有机太阳能电池, 无规共聚, 界面工程, 透明电极

D05-07

碳基纳米阵列材料的构筑及其在能源领域中的应用研究

王帅

华中科技大学化学与化工学院

纳米阵列结构具有“比表面积大、离子扩散路径短、稳定性高”等优势，被认为是最有潜力的柔性电极结构，本课题组从材料的表面电子和分子结构分析入手，创新地将自牺牲模板法和柯肯达尔效应引入到液-固相反应中，构筑了一系列高性能纳米管阵列柔性电极；提出了通过电势驱动原子掺杂技术从分子层次上改善金属氧化物的导电性，构筑了基于金掺杂二氧化锰的阵列电极，实现了电极的高储能性能；而基于电势驱动原子掺杂技术制备的阵列式多级纳米复合电极在超快速充电方面取得突破性进展。同时设计了一种新型三维多孔石墨烯纳米筛阵列，并采用气相原位透射电镜对石墨烯纳米筛阵列的演变过程进行实时观测，提出了一种高温条件下镍纳米颗粒与非晶态碳之间相互作用的“迁移-脱离-石墨化”机制。开发了一系列功能化石墨烯纳米筛阵列材料在能源存储与转换领域中的新应用。

关键词：碳纳米阵列，储能

D05-08

有机光伏的分子结构与结晶性控制

吕琨，魏志祥

国家纳米科学中心

给-受 (D-A) 型聚合物或者小分子为给体，与富勒烯衍生物 (如 PCBM) 或非富勒烯受体共混作为活性层的本体异质结 (BHJ) 型有机太阳能电池 (OSCs) 的效率已经取得了重要的进展并因其可大面积制备、柔性等原因，逐渐成为新能源领域的研究热点并受到国内和国外众多研究小组的广泛关注。

参会人所在课题组近年来，通过分子设计，合成了一系列的高结晶性的寡聚物分子；如通过将聚合物进行裁剪的方式，将聚合物的 2-3 个重复单元独立出来作为寡聚物型小分子，结晶性提高，器件的填充因子明显提高；在小分子中引入氟化端基，调控分子间弱相互作用力，从而形成多级次的相形貌结构；通过将聚合物，小分子与 PCBM 共混形成三元体系，改善了活性层的结晶性，也可以极大的提高填充因子；在非富勒烯体系中，稠环非富勒烯分子的结晶性对器件性能也有很直接的影响。因此，结晶性在有机光伏中扮演了重要角色。

关键词：有机光伏，结晶性

D05-09

刘波

Nature Communications 编辑

In this talk, I will briefly introduce the Nature Communications journal and focus on the peer review process in Nature Communications, including how the reviewers are selected, how to be a better reviewer for Nature Communications and how to make full use of the open/ free content in Nature Communications.

D05-10

基于聚合物纤维网络形貌的高性能有机太阳能电池

孙艳明

北京航空航天大学

目前有机太阳能电池的研究取得了显著的进展，最高效率已超过 13%。但是，聚合物结构-聚集态形貌-光伏性能之间关系并不十分清晰。因此，系统地研究聚合物分子结构与性能之间的关系对新材料的设计开发以及高性能器件的制备具有重要的意义。我们组多年来一直致力于新型聚合物给体材料的研究，通过分子骨架以及侧链工程，设计合成了一批性能优异的苯并二噻吩二酮类聚合物给体材料。我们系统研究了该类聚合物材料结构、形貌以及光伏器件之间的关系。研究发现薄膜状态下，苯并二噻吩二酮类聚合物材料易形成纳米纤维网络结构，通过控制其化学结构来调控聚合物纤维结构，可以实现对活性层形貌和相结构的有效调控，从而获得较高光伏性能。

D05-11

二维杂化钙钛矿薄膜的形貌调控及其光伏器件

陈红征

浙江大学高分子系

有机-无机杂化钙钛矿材料结合了有机、无机半导体材料可溶液加工、迁移率高的优势，成为目前光电领域研究的热点。

以 MAPbI₃ 为代表的三维结构杂化钙钛矿薄膜具有高吸光度、高迁移率、长激子寿命等优点，以之为活性层的太阳电池器件光电转化效率突破了 22%，但稳定性一直是限制其大规模应用的瓶颈。具有二维结构特征的杂化钙钛矿材料是继三维结构钙钛矿之后兴起的一类新型半导体材料。二维杂化钙钛矿材料一方面显示优良的潮湿稳定性，另一方面具有更为丰富的化学与晶体结构，在太阳电池、场效应晶体管、电致发光、光电探测、泵浦激光等前沿领域有很好的应用前景，已引起了国内外许多学者的研究兴趣。我们以具有较高耐潮湿能力的二维结构的杂化钙钛矿材料作为太阳电池的光活性层，研究二维杂化钙钛矿中第二胺源的结构对于二维杂化钙钛矿的取向、结晶度、薄膜形貌的影响，通过添加剂对其晶体取向与薄膜形貌进行调控，实现了二维杂化钙钛矿在 PEDOT:PSS 基底上的垂直取向生长，避免了绝缘的第二胺源对载流子传输的阻挡，大幅度提高了二维杂化钙钛矿电池的光电转换效率和器件稳定性，器件效率最高达到 13.01%。

关键词：钙钛矿，薄膜形貌，光伏器件

D05-12

一种窄带隙强吸收聚合物受体

张志国

北京化工大学

D05-13

氯取代聚合物太阳电池材料的设计、合成及器件应用

何凤

南方科技大学

D05-14

有机微纳激光材料

赵永生

中国科学院化学研究所

D05-15

石墨烯组装薄膜的构效关系

李春

清华大学化学系

利用 Hummers 和 Hofmann 方法制备结构和尺寸可控的氧化石墨烯，以其为前驱体和构筑基元通过蒸发诱导或真空辅助过滤组装方法制备组成、微结构可控的石墨烯组装薄膜材料。研究构筑基元化学及拓扑结构、尺寸、组装方式、组装结构对组装薄膜力、电性能的影响，揭示石墨烯组装薄膜材料力、电性能与构筑基元、构筑方式间的构效关系；探索石墨烯组装薄膜在能量储存器件中的应用。结果为制备力学、电学性能优异的石墨烯组装薄膜材料及其应用探索提供理论及技术指导。

关键词：石墨烯，薄膜，电导率，强度，构效关系

D05-16

有机功能材料与分子尺度器件研究

李涛

上海交通大学化学化工学院

分子电子学是一门新兴前沿交叉学科。从广义上讲，其目标是基于有机光电功能材料实现新一代柔性电子器件的制备；更具挑战性的是分子尺度电子学，关注单个分子、超分子或分子簇的光、电、磁等特性，在此基础上制备电子元器件，并进一步组装实现逻辑电路的功能。由于传统加工和表征技术的局限性，将个体分子与接触电极相连组成稳定工作的电学器件是一项巨大挑战，而可调控、多功能分子材料的设计合成则是该领域发展的基础。我们从分子设计的角度出发，合成了一系列具有光致变色特性的分子，基于不同的锚定基团研究了它们在金基底上的自组装行为，在此基础上利用透明的石墨烯上接触电极，实现了由光学栅极原位调控的单分子膜固态开关器件的制备。此工作深入研究了分子的共轭结构、锚定基团、能级以及分子间的排列方式等对器件性能的影响，同时是对分子尺度器件实用化进程的有益探索。

关键词：分子电子学，自组装单分子膜，分子开关，单分子膜开关器件

D05-17

有机半导体结晶薄膜晶体管的制备与物理

刘川

广州中山大学

有机薄膜晶体管(OTFT)含有大量的界面缺陷和体缺陷,导致其电流-电压特性偏离理想的场效应晶体管或晶体管特性。界面缺陷多表现为功函数失配、界面态、表面复合影响的肖特基电荷注入;而体缺陷则表现为微晶结构或高聚物链的堆叠间隙等。因此,小分子结晶和器件制备、器件物理都对提高器件性能功能有重要作用。

针对含苯酚的小分子的结晶方法和器件制备以及性能理解,我们做了系统的理论和实验研究。对小分子结晶,我们研究了气氛退火、定向涂布、定向滴涂等方法,引导小分子形成高质量的结晶薄膜,并发展出通过调整固体-液体-气体三相界面的表面自由能,控制溶液态的成膜过程和诱导结晶,制备出较理想的晶体薄膜。在器件制备方面,针对界面缺陷态,我们提出了定量表征的研究方法,验证了表面复合在注入中的作用。并通过发展电极注入层、器件结构设计,降低接触电阻的系列方法,得到了接近欧姆接触的金属-半导体界面[1],从而得到比较理想的晶体管性质并使迁移率稳定的大于 $5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。而在理论上,我们提出了通过能带的非局域化衰减参数,定量描述结构或能量缺陷态对微观迁移率和宏观迁移率的影响。

D05-18

同分异构体的单分子尺度识别

张浩力, 张玉鹏, 陈力川

兰州大学

同分异构现象广泛存在于自然界。有机化学中,同分异构体是指相同的分子式,但结构可能不同。部分有机同分异构体结构差异很小,但是性质差异很大。因此,识别和鉴定同分异构体对于基础研究和实际应用具有非常重要的意义。利用同分异构体电子输运性质的细微差别,有可能实现单分子尺度的识别。近年来,科学家已经尝试了糖类、DNA、氨基酸、多肽异构体的单分子尺度识别。但是,已报道的测试技术和分析方法很复杂。

在近期的工作中,我们探讨了利用 STM 单分子结与机械可控单分子结电化学测量技术实现单分子尺度识别有机小分子异构体的可行性。我们尝试利用直接的电导测量方法,实现小分子异构体的单分子尺度识别。本工作中所研究的两个 DPP 异构体分子具有相同的分子长度,非常相似的核心结构,仅仅烷基的取代位置不同。因此,正常条件下,两个异构体分子具有相似单分子电导性质。但是,其中一个分子可以在酸性条件下发生质子化,并且伴随着分子电导发生数量级的变化,使得两个异构体分子之间电导差异显著增大。理论研究表明,引起该分子的电导发生可逆酸/碱响应的原因是由于分子结中出现相消量子干涉现象。本工作为实现同分异构体的单分子尺度识别和构建分子器件提供了新的思路。

D05-19

新型聚集诱导发光分子的设计、制备与应用

秦安军

华南理工大学

聚集诱导发光(AIE)是唐本忠教授于2001年提出的光物理领域的一个概念,是指一类在溶液中不发光或发光微弱的分子在聚集后或者固态荧光显著增强的现象。AIE效应已经引起了世界范围内研究人员的兴趣。目前,已有多种AIE分子体系被报道,但主要还是集中于以四苯基乙烯(TPE)、Silole、二苯乙烯葱等为核的体系。为了进一步扩展AIE领域的研究,需要设计和合成更多的核心分子体系。

基于AIE的分子内旋转受限(RIR)机理,并借鉴TPE的结构特点,我们将TPE中的双键换为更加稳定的苯基或者吡啶基团,分别制备了新型的四苯基苯(TPB)和四苯基吡啶(TPP)的AIE分子体系(图1)。这两类AIE体系,特别是TPP体系非常便于衍生,可以制备具有良好热和化学稳定性以及发光颜色可调性的衍生物。由于TPB和TPP分子中不含具有顺反异构特性的双键基团,可以大大简化对RIR的理解。另外,基于TPP易于修饰的特点,我们以一价铜催化的含TPP的双炔和双叠氮单体的点击聚合制备了具有聚集荧光增强特性的聚三唑,并实现了对银离子的特异性检测。

本工作得到国家自然科学基金(21788102, 21525417和21490571)资助。

关键词: 聚集诱导发光, 四苯基吡啶、四苯基苯, 点击聚合

D05-20

有机共晶体材料的制备及光电性能

王雨, 孙玲杰, 张小涛, 胡文平

天津市分子光电科学重点实验室; 天津大学理学院化学系

有机共晶被称为有机合金, 利用两种或多种材料分子组装的方式来实现新的材料性能。我们采用简易方法设计制备了两种有机共晶材料, 基于 C60 与碗烯的共晶表现出了较好的电子迁移率和好的光响应; 而 DBTTF 和 TCNB 的共晶在近红外激光照射下, 共晶体的温度在很短的时间内迅速升高, 具有高效的光热转换效率 (18.8%), 飞秒瞬态吸收光谱揭示其机理是由于活跃的非辐射途径和抑制辐射跃迁过程。

D05-21

有机近红外发光材料

蒋佐权

苏州大学

D05-22

基于热活化敏化发光机制的有机发光二极管

段炼

清华大学化学系有机光电子与分子工程教育部重点实验室

在有机发光二极管中, 受自旋统计规律 (spin statistics) 限制, 传统的荧光材料只能利用 25% 的单线态激子发光。2009 年, 日本九州大学的 Adachi 等提出, 可通过采用热活化延迟荧光 (TADF) 材料从而实现内量子效率接近 100% 的荧光 OLED。但是, 在 TADF 材料中难以同时获得窄的单三线态能隙 (ΔE_{ST}) 和高的辐射跃迁速率 (k_r), 这不仅为 TADF 材料的设计和光谱的调控带来很大的困难, 也使得基于 TADF 材料的 OLED 器件在高亮度下效率滚降 (roll-off) 严重。为了解决上述矛盾, 我们引入了“敏化”发光机制, 利用 TADF 材料作为主体, 掺杂高发光效率的磷光或荧光染料, TADF 材料中的单线态激子通过高效的 Förster 传递将能量传给发光染料, 并由后者发光 (图 1)。这样, 上转换过程和发光过程分别在不同的材料上完成, 器件的发光效率取决于 TADF 材料的三线态上转换效率和染料的发光效率, 从而可获得高性能的热活化敏化磷光或热活化敏化荧光 OLED。

D05-23

硫杂蒽酮衍生物及 OLED 器件研究

王鹰

1. 中国科学院理化技术研究所

2. 中国科学院大学南昌大学

基于纯有机芳香化合物的热激活延迟荧光 (TADF) 材料由于其有效的三线态-单线态反向系间窜越, 可实现 100% 的内量子效率, 引起了研究者的极大兴趣。硫杂蒽酮 (TX) 及其衍生物是聚合反应的三线态敏化剂或光引发剂。该类化合物较小的单线态-三线态能隙和较高的发光效率, 有利于通过结构优化获得高效的 TADF 材料。本文以硫杂蒽酮单元作为 TADF 材料的构筑单元, 设计合成了一系列新型 TADF 材料, 系统研究了其在有机发光二极管器件中的应用。

关键词: 硫杂蒽酮衍生物, 热激活延迟荧光材料, 有机电致发光器件

D05-24

水面空间限域法生长大面积二维有机单晶

李荣金, 王晴晴, 胡文平

天津大学

二维有机单晶为单分子层或数个分子层厚的有机分子通过范德华力作用周期排列形成的晶态薄膜。相比于无机二维原子晶体, 二维有机单晶可采用溶液法低温加工, 从而可沉积在塑料衬底上制备柔性器件。此外, 有机功能分子的结构可通过分子设计控制, 为二维有机单晶的结构和光电性能调控提供了无限多的可能。有机二维单晶的生长需要低的成核密度和二维生长模式, 缺乏有效普适的生长方法。我们发展了水面空间限域法: 水面生长降低了成核密度, 相转移型表面活性剂的加入

增加了溶液在水面的铺展，从而实现了低成核密度、二维生长模式，获得了多个有机半导体的亚厘米尺度的二维有机单晶。基于二维有机单晶的晶体管表现出了良好的场效应性能。水面空间限域法提供了一种生长大面积、自支撑、易于转移至任何衬底的二维有机单晶的有效方法，有益于未来基于二维有机单晶的光电器件的基础研究和技术应用。

关键词：有机单晶，二维单晶，有机场效应晶体管

D05-25

高效全聚合物太阳能电池材料与器件

黄飞

华南理工大学

全聚合物太阳能电池具有稳定性高、力学性能好等优点。然而，全聚合物太阳能电池的性能相比于基于聚合物/小分子的电池器件仍然有一定差距。我们发展一系列基于酰亚胺功能化的苯并三唑基团（简称 TzBI）的宽带隙共轭聚合物给体材料。这些宽带隙共轭聚合物具有平面性好、HOMO 能级深、吸收系数高等优点。采用这些宽带隙共轭聚合物可以制备高效的富勒烯太阳能电池器件与非富勒烯太阳能电池器件。不仅如此，我们发现这些宽带隙共轭聚合物给体材料与 N2200 受体材料具有很好的吸收互补特性，当采用 2-MeTHF 作为加工溶剂时，全聚合物太阳能电池器件可以获得超过 9% 的能量转换效率。此外，通过对这类宽带隙给体材料进行侧链调节可以进一步提高全聚合物太阳能电池的能量转换效率，达到 10.1%。我们还在二元全聚合物活性层中引入了第三组分的高迁移率给体材料，显著改善其厚度依赖特性，极大地提高了全聚合物太阳能电池的加工窗口。这些新材料和加工方法为高效全聚合物太阳能电池的制备提供了新方案，并在未来大面积全聚合物太阳能电池器件制备方面表现出极大的潜力。

关键词：聚合物太阳能电池，全聚合物，共轭聚合物，三元

D05-26

类皮肤柔性光电集成器件及其健康医疗应用

冯雪

清华大学

D05-27

绝缘层表面能对有机场效应晶体管载流子传输的直接影响

汤庆鑫，周淑君

东北师范大学

有机场效应晶体管具有重量轻、柔韧、在形变条件下保持电学性能等优点，在仿生电子皮肤、可植入生物芯片和柔性显示等新一代弹性/柔性可穿戴智能产品应用中具有显著优势。迁移率是评价有机半导体材料和晶体管器件性能的重要指标之一，决定了器件的开关速度、驱动能力和器件尺寸，迁移率越高，应用领域越广。场效应器件在工作时，导电沟道位于半导体内紧靠绝缘层的一个或几个分子层内，使得器件的电荷传输及电学性能强烈依赖于绝缘层的表面性质，因此绝缘层表面修饰成为提高器件迁移率的主要方式之一。对于薄膜器件，绝缘层性质不仅影响载流子传输，还影响薄膜生长，不利于研究本征性质，各种理论众说纷纭，国际上很多课题组的研究成果彼此矛盾。例如，粗糙度越低的绝缘层表面更利于薄膜的生长，有利于载流子的传输；然而也有在高粗糙度的绝缘层上获得高迁移率的报道。非极性的绝缘层比极性绝缘层更有利于获得高迁移率的场效应器件；却解释不清极性相似的绝缘层彼此间迁移率的差异。对于表面能，不同课题组在低、高和与半导体表面能相等的绝缘层上都获得了高迁移率的器件。

我们首先利用物理气相输运法生长超薄的 Ph5T2 单晶，通过机械转移的方式在八种绝缘层上制备单晶场效应晶体管，研究绝缘层表面性质对 Ph5T2 单晶器件迁移率的影响。实验结果显示，绝缘层的极性、粗糙度和总表面能都不是决定器件性能的关键因素；只有当绝缘层与半导体表面能的极性和色散分量均匹配时，器件的迁移率最高。Ph5T2 单晶器件在与其表面能的极性和色散分量均匹配的 BPPH/SiO₂ 绝缘层上，最高迁移率可达 2.15 cm² V⁻¹ s⁻¹。理论分析表明，表面能匹配可以减小半导体和绝缘层间的界面张力，进而减小导电沟道附近的浅缺陷密度，有利于获得高迁移率的单晶器件。为了验证上述规律的普适性，选择传统的并五苯和酞菁锌（ZnPc）单晶，在不同表面能的绝缘层上制备其单晶场效应晶体管。实验结果表明，并五苯和 ZnPc 单晶器件分别在与半导体表面能分量匹配的绝缘层（p-6P/SiO₂ 和 OTS/SiO₂）上获得了最高迁移率，分别为 5.29 cm² V⁻¹ s⁻¹ 和 0.60 cm² V⁻¹ s⁻¹，成功验证了表面能匹配提高迁移率规律的普适性。这一结论与目前多数被广泛接受的理论兼容，并能解释一些现有理论与实验间存在的矛盾，是有机场效应基础理论领域的重要突破，将极大简化有机场效应

器件绝缘层的优化选择过程和新材料本征性能的研究过程。

关键词：有机单晶，场效应晶体管，绝缘层，表面能，迁移率

D05-28

低电压/低功耗柔性离子敏感有机场效应晶体管

郭小军

上海交通大学电子工程系

随着高性能有机半导体材料，以及相关加工工艺的发展，以有机场效应晶体管（organic FET, OFET）构建离子敏感传感（ion sensitive OFET, ISOFET），以应用于各类生物、化学检测成为研究的热点。以溶液法/印刷工艺制备低电压 OFET 器件以及固态参比电极，并实现集成，是推进 ISOFET 传感应用的关键。本论文将首先介绍通过降低沟道层深禁带态密度以及 high-k/low-k 双层栅介电层两种方法，减小压阈值摆幅，实现低电压、具有良好的工作稳定性，并能很好兼容全溶液法/印刷工艺的 OFET 器件。进一步研究了基于介孔结构 PVB 隔膜覆盖 Ag/AgCl 电极实现了具有良好稳定性的柔性薄膜参比电极。最后将通过将低电压 OFET 器件与柔性薄膜参比电极集成，实现了柔性的 ISOFET 系统，应用于多种离子的检测。

D05-29

高效钙钛矿发光

王建浦

南京工业大学

D05-30

有机太阳能电池中的微相结构调控与大面积柔性器件

魏志祥

国家纳米科学中心

有机太阳能电池一般利用电子给体与受体的二元共混体系作为活性层，三元体系利用两种不同的给体材料与富勒烯受体（或一种给体与两种受体）共混作为活性层，两种给体材料通过协同效应拓宽活性层的吸光利用范围、优化活性层的形貌结构，有望大幅度提升有机太阳能电池的器件性能。本报告将介绍我们在有机小分子和三元体系的研究工作，通过小分子的诱导结晶、给/受体界面修饰等方法，使得薄膜的结晶性和微相分离结构发生了明显改善。三元体系中不同给体体现出明显的协同效应，通过改变有共轭分子给体比例，可以连续调控活性层的结晶性和相分离尺度，使得该三元体系具有巨大的发展和提升空间。同时，我们在柔性大面积器件上获得超过 8% 的效率，显示出在柔性光伏器件中可能的应用前景。

D05-31

具备不同固定基团的 OPE-TTF 十字形分子及其单分子器件

魏钟鸣

中国科学院半导体研究所

单分子器件是通过制备金属/分子/金属异质结器件，研究单个分子或者自组装单分子层（self-assembled monolayers, SAMs）中一小束分子的电荷传输性能，以深入揭示分子结构和传输性能之间的内在联系。在此，我们将苯乙炔寡聚物（OPEs）和四硫富瓦烯（tetrathiafulvalene, TTF）相结合获得新型十字形分子，成功制备出高质量的 SAMs。通过分子器件的测试，发现 TTF 取代基可以显著提高 OPE 骨架的电导率。针对该 OPE-TTF 十字形分子体系，我们主要采用了三种不同的固定基团：1) 巯基（thiolate）；2) 氨基（amine）；3) 二硫代氨基甲酸盐（dithiocarbamate）。进一步对具有不同分子长度、不同取代基位置的多种分子进行了全面的器件探索，综合总结了该体系分子结构-电学输运性能之间的关系，多种实验测试手段获得的结果趋势一致。同时，发现采用具有不同功函的电极构筑单分子器件时，该十字形分子仍然显示出相同的结构-性能关系。

D05-32

有机场效应晶体管的性能调控方法与传感应用

黄佳

同济大学

有机半导体具备低成本大面积制备的潜力与优势，因而获得了较多的研究兴趣，其应用范围从发光显示、光伏器件等应

用进一步拓宽到了传感器领域。有机半导体由于其电荷输运机理与能带结构的独特性，具有比常规无机半导体材料更显著的环境敏感性，其电学性能会随着环境而变化。这在一方面导致了其电学性能稳定性较差的缺点，但另一方面也使其获得了作为传感材料的极大应用潜力。通过调控这类半导体材料的稳定性与灵敏度之间的平衡，可以获得具有较好稳定性的传感器，并应用于化学传感、温度传感、光敏传感等领域。而场效应晶体管结构的引入，能使得单一器件同时兼具传感与信号放大的功能，从而进一步提升器件的可调控性，有效地提升其电流输出信号强度。基于有机半导体的场效应晶体管传感器也因此吸引着越来越多的研究兴趣，而如何进一步提升此类传感器性能是本领域当前研究的一大重点。我们的工作聚焦于研究如何通过一些简单易行的方法和策略来有效提高此类器件的性能，包括通过半导体/绝缘层之间的界面电荷陷阱效应来提升光电传感性能；通过半导体分子结构的调控，以及半导体材料微结构的调控，在维持器件稳定性的前提下，来有效提高器件的化学灵敏度和光电转换效率，以及提升器件的反应速度、反应强度和选择性。通过这些方法，我们获得了多种类型的柔性薄膜传感器件，并整合为器件阵列，从而进一步提升器件的探测选择性，并初步演示和实现了二维图形光电探测的功能。此外，有机场效应晶体管的一个现存的问题是工作电压偏高，往往需要几十甚至上百伏特的电压驱动工作，这在许多便携式器件的应用中很难实现，我们通过利用生物质材料与有机半导体结合，制备了能在低电压下工作的柔性透明的有机场效应晶体管。在 5 伏特、甚至 2 伏特的电压下器件展现出良好的晶体管性能，本方法对 P 型、N 型器件都使用，并且可以制备柔性、透明的晶体管阵列。

关键词：有机场效应晶体管，传感器，低电压

D05-33

超分子受体光伏材料

薄志山

北京师范大学

D05-34

面向光学可擦写显示技术的结构色程序化调控

俞燕蕾，秦朗，韦嘉

复旦大学材料科学系

在信息化时代，开发能够动态显示信息和数据的技术具有重要的意义，像纸一样轻薄的反射式显示器引起了研究者的广泛关注。一般显示器的背光设备在阳光下表现不佳，可视化程度低，而反射式显示器因其不需要背光源且具有高反射率和对比度而独具优势。光响应胆甾相液晶(CLCs)是一种多功能的软物质材料，自身的螺旋超结构可以根据布拉格定律选择性地反射入射光，并且能在光刺激下改变反射波长，实现颜色的动态调控，在反射式显示器中具有潜在应用。相比于其他刺激源，光刺激具有远程、精确、瞬时和定点操纵的优势。

本次报告中，我们展示了一种 RGBB(红绿蓝黑)反射显示新策略。以往大多数体系由于光响应手性分子的螺旋扭曲力变化不足，必须牺牲一种可见光区的颜色作为背景。我们将两种不同的偶氮苯巧妙的结合到一个手性结构当中，构建了新型三稳态手性分子。手性分子的三种稳定结构赋予了 CLC 两个连续且相邻的反射波段，不仅覆盖了整个可见光范围，而且还拓展到了近红外区域。利用这种分段调控的 CLC 系统，我们首次创制了带有黑色背景的红、绿、蓝(RGB)彩色图案。

此外，我们还报告了一种简单通用的策略来精确调控 RGB 颜色。我们将光响应的手性分子拆分为两个独立的简单结构（手性掺杂剂和光开关）并且掺杂到液晶主体中，就能得到光驱动的 CLCs。以含氟偶氮苯作为光开关和联萘衍生物作为手性掺杂剂制备的 CLC 能够在整个可见光区域实现反射颜色的可逆调控。不仅如此，我们可以利用三种波长的光精确调控 CLC 呈现 RGB 颜色。有趣的是，RGB 图案可以轻易地被不同波长的光擦除和重写，展示出我们的方法在光学可擦写显示器应用中的方便性和灵活性。

关键词：结构色，胆甾相液晶，光响应

D05-35

二维层状半导体器件的基本科学问题研究

胡平安

哈尔滨工业大学

二维层状无机材料有望应用于未来纳米电子学和光电子器件。我们系统研究了介电层和金属接触对二维半导体器件性能的影响规律，我们发现：在氧化介质中，从化学杂质的羟基和被吸收的水分子的载流子散射在确定 2D 层状半导体基 FET

的迁移率中起着中心作用，并且抑制这种载流子散射可以显著增强。2D 层状半导体器件的特性。在以上基层上构筑了一系列基于二维半导体的高性能电学与光电器件：如高灵敏的仿皮肤电子器件，双色增强的自驱动光电探测器等。

D05-36

Electron-Vibration Interaction in Molecular Electronic Devices

于曦

天津大学

D05-37

单晶复合有机光电功能材料

李寒莹

浙江大学

有机光电功能材料与器件集中发展了近三十年，取得了很大的进展。从材料聚集态的角度来思考，这近三十年的研究沉淀出两个关键词——“有序”和“复合”。一方面，有序的分子堆积有利于材料中的传输过程（如载流子的传输），理想的有序材料是单晶。另一方面，单一的材料通常不能实现所需的光电功能，因此多种材料常常被复合在一起，协同地工作。有趣的是，表象上，“单晶”与“复合物”是两个材料学上看似矛盾的概念，因为单晶具有纯的化学组成，而复合物则相反。因此，有机融合材料有序化与复合化成为有机光电领域的挑战之一。针对该问题，我们从典型的有机异质结结构（平面异质结和本体异质结）出发，建立了溶液制备有机单晶异质结的方法，揭示其有序复合机理，并发展出基于单晶复合的光电功能材料与器件。

D05-38

二维共轭聚合物材料的多层级调控

张帆

上海交通大学化学化工学院

以石墨烯为代表的二维材料表现出完全不同于传统材料的优异物性和化学活性，新型二维材料的不断涌现极大拓展了材料学科的研究范畴，促进了相关交叉学科的快速发展，在基础和应用研究方面表现出巨大的发展潜力。其中，二维共轭聚合物材料是近几年发展起来的新兴合成物种，既延续了传统共轭聚合物的高度可设计性，具有精确的分子结构等特点，又表现出明显不同的特质，如，拥有与石墨烯等纳米碳类似的轻质富碳骨架，并能通过丰富的聚合单体变化以及聚合反应方法的开发，引入多种官能团，乃至获得特殊的拓扑结构和图案化编辑等。在这里，我们从分子及材料设计出发，有效结合模板法、自组装操作以及动态供价化学等手段和技术，探索二维共轭聚合物材料的有效制备方法，致力于开发高结晶性不饱和碳骨架的构建策略，实现二维共轭聚合物材料的多层级结构及形貌的可控调节；进而，结合材料的催化活性和电学行为等对所制备材料的物性和化学活性进行深入、系统研究，建立二维共轭聚合物材料的构效关系。

关键词：石墨烯，二维材料，共轭聚合物，催化活性，电学行为

D05-39

基于“等规双受体策略”构建吡啶噻二唑基双极性聚合物半导体

陈华杰¹，朱春光¹，赵志远²，孙艳明³，刘烽⁴，郭云龙²，刘云圻²

1.湘潭大学化学学院高分子教研室

2.中国科学院有机固体实验室

3.北京航空航天大学化学与环境学院

4.上海交通大学物理与天文学院

双极性聚合物半导体在有机场效应晶体管（OFET）、逻辑互补电路和发光场效应晶体管等领域具有广阔的应用前景，但该类材料面临着迁移率低、载流子传输不平衡、构建单元稀缺等挑战。目前，高迁移率双极性聚合物半导体主要由吡咯并吡咯二酮和异靛衍生物单元构建而成，而且仅有少数材料的空穴和电子迁移率能够同时超过 $3.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。因此，探索新的分子设计策略以及开发新的电子受体单元依然是解决这些难题的关键所在。

吡啶噻二唑（PT）是一类电子亲和力强、共平面性好以及简单易得的杂环类电子受体，被广泛用于开发 p-型聚合物半导体[5]。然而，电子传输型 PT-基聚合物半导体鲜见报道。本文运用“等规双受体策略”，将两个结构不对称的吡啶噻二唑

(PT)受体单元直接相连,合成了一类电子亲和力更强、骨架共轭更大的等规双吡啶噻二唑受体(BPT),并将其引入到D-A型共聚物的主链中,成功开发了第一个PT-基双极性聚合物半导体(PBPTV)。在空气中,顶栅底接触型PBPTV薄膜OFET器件展现出高迁移率、空气稳定的双极性电荷传输行为,其最高空穴和电子迁移率分别达 6.87 和 $8.49\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ 。由于顶栅PMMA介电层的封装效果,该器件放置在20~40%的空气湿度环境下,其器件载流子迁移率在100天内几乎不衰减。

关键词:等规双受体策略,吡啶噻二唑,双极性聚合物半导体

D05-40

单分子尺度电运输的量子干涉效应:新尺度的新效应

洪文晶

厦门大学

单分子尺度有机共轭分子器件的电子运输性质研究提供了分子电子结构的重要指纹信息,可以为从分子尺度设计材料和加工器件提供直接依据。在过去几年中,基于扫描隧穿裂结技术和机械可控裂结技术,我们研发了一系列具有飞安级电流灵敏度的单分子电子学测量仪器。在此基础上,我们通过采用苯环和吡啶分子的临位、间位、对位连接作为模型体系,系统、定量地研究了分子设计中不同连接位点对分子结电子运输的影响,并且通过与理论研究者的合作,揭示了单分子器件中不同电子运输通道之间的量子干涉效应及其协同作用。

我们还进一步设计了系列具有电化学响应能力的分子体系,通过将电化学调控与单分子器件的电学测量相结合,系统探索了电化学电位对单分子器件的能级和分子结构的调控作用。利用离子液体在电化学调控中的独特优势,我们对葱醌分子中电子运输的量子干涉效应实现了直接调节。基于量子干涉效应所带来电导显著差异,我们发展了通过单分子电学测量光反应动力学的新方法。

关键词:量子干涉效应,单分子器件,单分子结,电运输

D05-41

N型聚合物半导体热电材料的研究进展

裴坚

北京大学

D05-42

热激活延迟荧光材料及其电致发光器件

杨楚罗, 龚少龙, 谢国华

武汉大学化学与分子科学学院

在OLED器件中,空穴和电子复合会产生25%的单线态激子和75%的三线态激子,OLED的效率很大程度上取决于器件的激子利用率。传统OLED采用荧光发光材料,只能利用25%的单线态激子,剩余的三线态激子以非辐射方式失活,其效率低下,制约了其产业化应用。设计和开发高激子利用率的发光材料一直是OLED领域最为活跃和重要的研究课题,也是促进OLED产业化的关键。目前,重金属配合物磷光材料和TADF材料已被证明是两类可以实现高激子利用率的发光材料。

本课题组通过采用多种新型电子受体单元及多种分子连接策略,构建了多种高效的新型热活化延迟荧光材料体系,并构筑了多色高效有机电致荧光器件,特别是在橙红光TADF材料和器件方面取得重大突破,获得了目前报道的橙红光TADF器件的最高值(29.2%的外量子效率)。另外,本课题组通过将TADF分子树枝化和作为侧链引入高分子体系,发展了一系列溶液可加工的热活化延迟荧光材料,获得了高效的非掺杂有机电致荧光器件。

关键词:热激活延迟荧光,电致发光器件,荧光材料

D05-43

二维材料纳米卷的制备与器件研究

郑健

中国科学院化学研究所

二维过渡金属二硫族化合物(TMDs),由于量子限制效应,展示了许多与其块体材料不同的光、电、磁性质。作为一种原子级厚度的纸状薄膜材料,通过折叠和卷曲的组装过程可以把二维材料相对简单的结构变成复杂的拓扑结构,如纳米卷

(NS)。这种纳米卷在继承原有结构优异特性的同时，会产生与众不同的新性质。但是，目前的研究现状受限于机械强度和化学稳定性，高质量 TMDs 纳米卷的制备存在巨大的挑战。

研究者开发了一种简便的溶液诱导组装方法，首次可以几乎无损地获得本征 TMDs 纳米卷。气相沉积法 (CVD) 制备的二维 TMDs 与衬底材料具有不同的热膨胀系数，因此从高温 (>700 °C) 生长完成到冷却至室温时在二维材料表面会产生较大的张力。研究者仅用一滴乙醇溶液，滴到 CVD 生长的二维材料表面，利用乙醇溶液的插入效应，在 5 秒钟内获得了高质量的 TMD 纳米卷 (图 1)，收率接近 100%。扫描电子显微镜、透射电子显微镜、拉曼测试表征展示了获得的 TMDs 纳米卷卷曲致密、无杂质、高结晶性的特点。基于其阿基米德螺旋结构，纳米卷的整个片层都能够参与载流子的运输，与单层 TMDs 片相比，TMDs 纳米卷的场效应晶体管迁移率是卷曲前单层 TMDs 片迁移率的 30 倍。独特的自封装结构使 TMDs 纳米卷展示了更高的光、电稳定性。此外，基于其内部开放的拓扑结构，以纳米卷为载体，在其间隙可调的层间可以负载有机半导体分子、聚合物、纳米粒子、二维材料以及生命活性物质获得在分子水平上复合的异质 TMDs 纳米卷，这将会赋予 TMD-NS 新的属性和功能 (图 2)。这些独特的性质为未来 TMDs 纳米卷应用于太阳能电池、光探测器、柔性逻辑电路、能源存储和生物传感等领域提供了材料基础。

关键词：二维材料 TMD 纳米卷场效应晶体管

D05-44

基于萹的有机光电功能分子

高希珂

中国科学院上海有机化学研究所

如何通过分子设计来获得高性能、新功能的有机共轭分子？目前，还不能很好的回答这一科学问题。因此，基于“结构决定性能”这一物质科学研究的基本原理，开展新型有机共轭分子的结构设计，发展新的核心共轭分子骨架，并研究其分子材料功能，具有重要的科学意义和研究价值。

萹 (Azulene) 是一种具有较大分子偶极矩的非苯芳烃化合物，与萘互为同分异构体。萹具有独特的化学结构和物理化学性质，成为设计合成新型有机光电功能分子的理想砌块。我们设计合成了全新结构的联萹二酰亚胺 (BAzDI)，其分子骨架在元素组成上仅比明星分子茱二酰亚胺 (PDI) 多两个氢原子。研究表明，BAzDI 具有特殊的分子结构和物理化学性质，有望成为一类新的重要的有机半导体材料结构砌块，用于构筑高性能、新功能的有机/聚合物光电子材料。近期我们合成了一系列 6,6 ϕ -芳基取代的 BAzDI 衍生物，其溶液法制备的有机薄膜晶体管 (OTFT) 器件电子迁移率高达 $0.52 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，是目前报道的萹基 n-型有机半导体的最高性能，性能也处于可溶液加工的 n-型有机半导体的前列。单晶结构解析等研究表明，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主要原因之一。

将 2,6-位连接的萹单元引入共轭聚合物主链，可以充分利用萹的分子偶极，获得强的聚合物链间作用，进而获得高的器件性能。在前期 BAzDI 研究工作的基础上，我们首次将 2,6-位连接的萹单元引入共轭聚合物主链，设计合成了共轭聚合物 P(TBAzDI-TPD) 和 P(TBAz-DITFB)，其 OTFT 器件电子迁移率可达 $0.42 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，这是 n-型聚合物 OTFT 器件的最优性能之一。薄膜掠入射广角 X-射线衍射表明，两个聚合物均以 edge-on 的形式排列在基底上，其 π - π 堆积距离约为 3.55 Å，是聚合物半导体中最短的 π - π 堆积距离之一。该结果表明，将萹的分子偶极引入共轭聚合物主链，增强聚合物主链的链间堆积，是获得高性能有机光电材料的有效策略。

关键词：萹，芳香二酰亚胺，结构设计，合成，光电功能

D05-45

高效率有机光伏电池中的激子解离驱动力与材料设计

姚惠峰，侯剑辉

中国科学院化学研究所

最近几年来，聚合物太阳能电池的光伏效率得到稳步而快速的提升，目前已经达到 14% 以上。光伏活性层中的电子给体和受体材料对于推动光伏效率的提升起到了至关重要的作用。我们以苯并二噻吩 (BDT) 类聚合物为基础，以提升光伏效率为主线，深入研究了此类重要电子给体材料的分子设计方法；基于该类给体材料，我们分别采用经典富勒烯受体 (PCBM) 和新近发展的非富勒烯受体为电子受体 (NF-A)，研究了活性层形貌调控方法和非富勒烯受体设计策略。传统的以给体-受体间分子能级差异为激子解离驱动力的原理已经无法解释此类高效率器件中的光电转换过程。近期，我们采用量化计算对多种给体与受体分子的表面静电势 (ESP) 进行了系统分析，发现给体材料具有较低的 ESP，而受体分子具有较高的 ESP，当

给体与受体之间形成有效的 pi-pi 堆叠时, 给体与受体之间将会形成分子间静电场 (IEF), 我们提出 IEF 在激子解离过程中起到至关重要的作用。在本报告中, 我们将在介绍近期在高效率有机光伏材料设计方法的基础上, 着重介绍 IEF 驱动激子解离的基本原理, 恳请得到大家的批评指正。

关键词: 有机光伏材料, 光伏效率, 分子静电势, 激子解离

D05-46

硅基非可见光探测器

徐杨

浙江大学

由于成熟的硅材料生长技术和器件加工工艺, 硅被广泛的应用于各类电子科技产品中。然而, 由于硅的本征带隙不能有效探测深紫外与短波红外光, 使得人们不得不利用 GaN、SiC、GaAs、InP 等材料。然而由于它们复杂的高温工艺, 不兼容传统硅工艺, 成本昂贵等因素应用受到限制。宽光谱探测是制备新一代高性能高集成度硅基光电探测系统的关键。

我们课题组近年来致力于将传统硅半导体结构及工艺与石墨烯等二维材料相结合, 即“传统半导体+二维”的思路, 系统的从实验上研究了用二维材料来提高硅基光电探测器性能的方法。团队围绕硅探测非可见光的科学难题, 从紫外、红外、及其图像传感三个方面入手, 取得了创新性成果: 1) 设计制备出了基于石墨烯/氮化硼/石墨烯/硒化钨/石墨烯的热电子晶体管, 热电子收集效率接近 100%, 电子输运过程中几乎不受散射, 获得高的工作频率。2) 发现石墨烯/氧化层/半导体区域可以带来常规肖特基结中不存在的负阻, 并通过设计了新的栅控二极管结构, 确定了原因分别为栅控表面复合和栅极下的势阱对光生空穴限制效应。3) 从响应物理机制出发, 提出硅与新材料协同吸收理论。通过将硅与石墨烯相结合, 初步突破硅紫外日盲探测的瓶颈; 4) 提出级联异质结构, 结合等离子体增强吸收, 提高了硅基红外光电探测性能; 5) 从单个探测器的制备到阵列的集成, 初步实现了具有应用潜力的硅基非可见光探测与图像传感系统。通过与 CMOS 信号处理结合, 有可能实现单个传感器上的多光谱融合技术。对未来实现低功耗、微型化、高可靠性器件, 和片上混合集成传感系统的研究提供帮助。

此外对各种将二维材料堆叠, 有机、无机、高分子聚合物等低维的纳米结构, 组装成三维结构实现不同功能进行了分析与讨论。同时对它们在能源、环境、传感和电子方面应用的挑战与机遇进行了展望。对实验中二维材料接触三维材料, 和它们形成的结的特性进行了系统的分析与讨论, 并进行了详细的文献综述。也对目前二维材料用于自旋量子比特的运输特性的困难与挑战进行了概述。

关键词: 硅基, 二维材料, 紫外, 红外, 光电探测器

D05-47

高性能有机薄膜晶体管的介电策略

孟鸿

北京大学深圳研究生院

有机电子器件的大规模产业化是实现新一代电子产品宏大愿景的关键环节。然而, 有机电子器件目前尚面临迁移率低、稳定性差等几个严重障碍。近年来, 尽管半导体材料设计和界面工程已取得了一定进展, 但电介质中的缺陷仍严重制约着有机薄膜晶体管的全面应用。栅介电层在调控有机薄膜晶体管 (OTFTs) 的迁移率、功耗和稳定性方面有重要作用。针对以上问题, 我们设计并合成了含氟介电材料, 使有机薄膜晶体管性能显著提高。器件具有超低的驱动电压 ($<3\text{ V}$) 和极小的迟滞效应, 操作稳定性高, 其中以 C8-BTBT 为有源层的晶体管迁移率可高达 $28.52\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$, 是低压驱动 C8-BTBT 器件的最高纪录。此外, 我们还实现了具有优异耐热性和电偏压稳定性的器件。采用氟化聚酰亚胺 (ODA-6FDA PI) 和二氧化硅双层材料作为栅介电层的薄膜晶体管在 -40 V 的栅压下 $\Delta V_{\text{th}} < 1\text{ V}$, $150\text{ }^\circ\text{C}$ 退火前后迁移率相对变化率 $< 2.9\%$ 。最后, 本文对含氟介电层提高有机薄膜晶体管性能的作用机理作了充分研究。结果表明, 氟化聚硅氧烷和聚乙烯醇的协同作用显著提高了半导体的沉积质量, 含氟聚酰亚胺的高疏水性和与并五苯更为匹配的热机械性能可提高器件的稳定性。这些研究表明, 栅极电介质在有机薄膜晶体管器件性能方面起着至关重要的作用, 我们坚信, 应用含氟介电材料的概念为有机薄膜晶体管的大规模产业化应用的美好蓝图提供了坚实的基石。

关键词: 有机薄膜晶体管(OTFT), 含氟介电材料, 低压驱动, 高性能, 稳定性

D05-48

仿生粘附可控粘附材料

王树涛

中国科学院理化技术研究所

D05-49

石墨烯二维大分子行为及宏观材料性能调控

许震

浙江大学

D05-50

二维 TMDCs 及其异质结的可控制备

付磊

中国科学院化学研究所

在二维晶体材料这一新兴材料家族中，过渡金属硫族化合物（transition metal dichalcogenides, TMDCs）具有丰富的化学组成与材料特性，近几年来成为低维材料研究领域的新热点。由于这类材料的能带结构及本征性质与其层数，应力，掺杂等因素密切相关，所以材料的可控制备和结构设计对其性质及性能研究至关重要。我们首次通过范德华外延的方法成功制备出少层及单层 HfS₂ 晶体，并基于此搭建了具有超高开关比的场效应晶体管 and 超高响应度的近红外光电晶体管。此外，通过抗硫化基底设计直接构建了 MoS₂/h-BN 异质结构，实现了对 MoS₂ 本征光致发光性质的直接观察。本次报告将主要介绍 HfS₂, MoS₂ 等二维半导体材料的可控制备、结构设计及其性能研究等工作。

D05-51

High performance solution-processed perovskite solar cells via device engineering and novel materials

巩雄

The University of Akron

Solution-processed perovskite solar cells (PSCs) for efficiently harvesting the solar energy have invoked extraordinary attentions in both academic and industrial sectors in the past decades. In this presentation, I would like to share with you how we approach high-performance solution-processed PSCs via device engineering and novel materials. Both cross-linkable ionomer and radical polymer as the interfacial layers to modify the interface between the hole/electron extraction layers and perovskite layer for boosting efficiency of PSCs have been demonstrated. In order to facilitate the electron extraction efficiency and make it comparable to the hole extraction efficiency in PSCs, we have demonstrated bulk heterojunction PSCs with enhanced efficiency and reduced photo-hysteresis. In order to balance charge transporting properties, enhance efficiency and stability of PSCs, we have developed novel perovskite materials incorporated with transition metal cations and rare earth cations for tune its optoelectronic properties. As a result, efficient and stable PSCs fabricated by these novel perovskite materials are realized.

Key words: perovskite solar cells, device engineering, novel materials

D05-52

自组装机微纳晶体激光材料与器件研究

付红兵¹, 金雪²

1. 首都师范大学化学系

2. 天津大学分子研究院

有机固体激光器因其制备简单，价格低廉和易于集成等优势，一直以来备受科研工作者的关注。传统无机半导体垂直腔面发射激光器（Vertical Cavity Surface Emitting Laser, VCSEL）由上下两层反射腔镜以及夹在中间的活性层材料组成，需要复杂的工艺流程和昂贵的成本。相比较而言，有机半导体材料可以通过低温溶液加工工艺进行激光器谐振腔的构筑，我们系统研究了分子结构—微纳谐振腔—激光性能三者之间的内在关联规律，将在报告中详细汇报本课题组在这一领域的研究进展。
关键词：激光，有机微纳晶体，光学微腔，聚集体，自组装，有机半导体，有机光电子学

D05-53

石墨烯材料在微型储能器件中应用研究

吴忠帅

中国科学院大连化学物理研究所

随着高度集成化、轻量便携化、可穿戴式、可植入式等新概念，特别是柔性化电子产品概念的不断提出，迫切需要开发与其高度兼容的具有高储能密度、柔性化、功能集成化的储能器件。本报告将向大家汇报我们在石墨烯基材料的控制制备、结构设计及其在柔性化、微型储能器件，如微型超级电容器研究中的最新进展。主要包括三个方面：(i) 在石墨烯类电极材料的制备方面，发展了一系列高容量、高导电、高堆积密度、发达孔隙的石墨烯基电极材料，获得了一系列高性能平面储能器件。(ii) 在薄膜电极的高分辨率、规模化制备方面，一方面发展了先进的微纳加工技术，获得高精度图案化、微型化电极，另一方面开发出高效、低成本、规模化的电极制备技术，如光还原技术、印刷技术、掩模版协助过滤技术；(iii) 在器件构型的创新与界面工程的融合方面，在国际上最早提出了在一个基底上构筑任意形状、三明治结构平面超级电容器的学术思想。发展了一种新型自串联集成的平面微型超级电容器模块，所得器件具有良好的机械柔韧性和高的输出电压。发展了高温热解 SiC 法制备出高密度、高导电性、单一方向的站立石墨烯阵列，由于石墨烯阵列直接生长在导电 SiC 基底上，在二者之间具有很强的界面键合作用，获得了超高的功率密度储能器件等。这些研究结果表明，石墨烯材料是发展超小体积、超轻量化移动电源核心材料之一，具有广泛的应用前景。

关键词：石墨烯，二维材料，微型储能器件，超级电容器，电池

D05-54

聚集诱导延迟荧光 (AIDF) 材料与高性能 OLED 器件

赵祖金

华南理工大学

聚集诱导发光 (AIE) 材料在聚集态下能够高效发光，为解决 ACQ 问题提供了新思路，也在光电器件，生物探针和化学传感等领域表现出独特的优势。AIE 材料是非掺杂 OLED 的理想发光材料，目前所开发的 AIE 荧光材料的器件效率已经可以达到理论极限。但是，大多数 AIE 材料仍然属于荧光材料范畴，其在器件中的最大激子利用率只有 25%，很大程度上限制了器件效率的进一步提高，所以在 AIE 材料中引入新的光物理机制，如热活化延迟荧光 (TADF)、三线态-三线态激子湮灭、室温磷光等，才有望在 AIE 材料的激子利用率和 OLED 效率等方面取得更大突破。我们开发出了具有聚集诱导延迟荧光 (AIDF) 特性的新型发光材料，实现了 AIE 和延迟荧光的有机结合，在保证高效固态发光的前提下，提高了材料在器件中的激子利用率。利用我们开发的 AIDF 材料制备的非掺杂 OLED 的亮度达到 100000 cd m^{-2} 以上，效率高达 72.9 cd A^{-1} ， 81.8 lm W^{-1} 和 22.6%，可以与掺杂器件的性能相媲美，而且非掺杂器件的外量子效率从最大值到亮度为 1000 cd m^{-2} 时的效率滚降几乎为零，亮度为 5000 cd m^{-2} 时的外量子效率仍然保持在 20.1%，器件的效率稳定性特别优异。该非掺杂 OLED 是目前文献报道最好的，这主要是受益于材料的 AIE 特性，其发光基团之间的相互作用较小，能够很大程度上抑制激子湮灭，降低效率滚降。该工作不仅开发出了一类结构简单，适合大规模生产的高效发光的 AIDF 材料，而且解决了目前 TADF 材料器件效率滚降严重的问题，在保证器件高效率和高稳定性的同事也简化了器件结构和制备工序，降低了生产成本。

关键词：聚集诱导延迟荧光，有机发光二极管

D05-55

有机光伏材料凝聚态结构与电荷传输性质的理论模拟

易院平

中国科学院化学研究所

电荷传输是有机太阳能电池实现光-电转换的重要过程。高的电荷载流子迁移率有助于电荷的分离和收集，提高有机太阳能电池短路电流、填充因子和能量转换效率。运用平衡和非平衡分子动力学，我们揭示典型有机光伏给体和受体的分子组装过程和堆积结构。进一步结合量子化学计算和动态蒙特-卡洛模拟，研究了它们的电荷传输性质，揭示分子结构和实验加工条件对分子堆积形貌和电荷传输性能的影响。

关键词：分子堆积，有机半导体，电荷传输

D05-56

单分子层分子晶体 (MMCs)

江浪¹，胡文平²，刘云圻¹，朱道本¹

1.中国科学院化学研究所

2.天津大学化学系

发展自组装单分子层是实现上世纪 70 年代提出的分子器件的一种重要途径。早期研究主要通过共价键形成的自组装单分子层 (SAMs) 来制备分子器件, 典型的是单分子层晶体管。最近, 单分子层分子晶体 (MMCs) 也被证实是单分子层晶体管的一种有效构筑方案, 并能克服前者较低迁移率的限制。发展与导电沟道厚度相当的 MMCs 为有机半导体电荷传输物理以及新型有机光电磁器件的研究提供了重要的平台, 也为有机半导体的掺杂与传感等应用提供了新的研究载体。然而, MMCs 难以大面积生长, n 型材料的缺乏, 以及仅能在无机基板上生长等都限制了其在电荷输运机理研究和复杂光电器件方面的应用优势。因此, 我们探索了 MMCs 形成的分子间内在因素, 发展自下而上的系列新方法实现 MMCs 的大面积制备, 并构筑高性能光电器件。进一步研究迁移率与温度变化的关系, 结合理论计算理解 MMCs 中分子结构与性能之间的关系, 揭示有机半导体电荷输运的物理特性。

D05-57

异靛蓝分子结构改造及其在有机电子材料中的应用

万晓波, 李晨晨, 王啸, 蔡勉

中国科学院青岛生物能源与过程研究所

异靛蓝是构筑高性能有机场效应晶体管材料和有机太阳能电池材料的重要结构单元, 但其结构中的一些缺点 (如非完全共平面、与邻近基团存在较大位阻以及自身吸电子能力不够强) 限制了其性能的进一步提升。针对这一问题, 我们从延伸异靛蓝的共轭长度、改善其平面性、增加其拉电子性能等三方面对其结构进行了一系列改造。其中, 由异靛蓝异构化而得的苯并萘啉二酮是具有完全共平面的新型受体单元, 由其构筑的宽带隙太阳能电池材料尽管带隙高达 2.3 eV, 仍展现出超过 6.5% 的光电转换效率, 在此基础上构筑的三组分太阳能电池材料光电转换效率超过 11%; 此外, 我们成功地合成了噻唑异靛蓝单元, 该结构结合了噻吩异靛蓝和吡啶异靛蓝的优点, 既与噻吩异靛蓝类似, 容易形成醌式结构从而导致吸收光谱大幅红移, 又与吡啶异靛蓝类似, 具备更强的拉电子能力。在此基础上构筑的场效应晶体管具有优异的双极型传输性能, 其空穴和电子迁移率分别高达 3.93 和 1.07 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1}$ 。

D05-58

π 体系分子设计与其性能之间的关系初探

李振

武汉大学

一般而言, 各种有机/高分子光电功能材料的分子设计均是基于不同类型和大小的 π 体系, 涉及不同芳香环之间的相互协同以及分子的空间拓扑结构。针对不同性质的光电功能材料, 其 π 体系设计理念也有较大差异。我们希望通过几个不同的典型例子, 初步探讨 π 体系分子的设计与其光电性能之间的关系, 引发大家对 π 体系分子设计的更多关注。

D05-59

Organic semiconductors for next generation display

Junyou Pan

Guangzhou China-Ray Optoelectronic Materials Co., Ltd

After three decades of development, organic light-emitting diodes (OLEDs) is now in booming time. Active matrix OLEDs (AMOLEDs) is becoming the mainstream technology in small-to-medium size display. In this talk, I will give an introduction to the status of AMOLED-based panel industry, especially the big projects to be launched in China. Then I will turn to the organic semiconductors, which have enabled the new display technology. In comparison to inorganic semiconductors, we will discuss firstly the distinguished features of organic materials, which give the diversity in material and device design. Then the status, problems of the high performance OLED materials, both for evaporation-based and printed OLEDs are reported. In line with this, some new directions for basic and theoretical research will also be discussed shortly on demanding from industry.

D05-60

原子层沉积技术在光电器件中的应用

张建华

上海大学

有机电致发光 (OLED) 是新型显示和照明器件, 向着更薄, 柔性, 大尺寸方向发展。原子层沉积技术 (ALD) 由于其沉积参数的高度可控型 (厚度, 成份和结构), 优异的沉积均匀性和一致性使得其在 OLED 领域具有广泛的应用潜力。为了降低 OLED 的功耗, 降低其驱动的薄膜晶体管的工作电压是技术手段之一, 通常可以通过采用高介电常数 (K) 的绝缘材料或者降低介电层厚度的方法降低晶体管工作电压。本文研究了基于 ALD 技术的高 K 氧化物薄膜晶体管的制备, 构筑厚度仅为 120 nm 的高 K 介电材料 ZrO_2 作为介电层, 射频磁控溅射制备 IGZO 作为有源层的晶体管, 器件迁移率高达 $24.5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, 开关比为 10^7 , 阈值电压仅为 0.04 V, 亚阈值摆幅 0.12 V/dec., 热稳定良好, 器件的阈值电压偏移只有 0.13 V (从 25-100°)。由于 OLED 器件所用有机材料极易与水、氧发生反应, 导致器件失效, 玻璃封装虽然可以有效阻隔水氧, 但是玻璃是刚性基板, 无法满足柔性 OLED 的封装需要, 因此可以弯折的柔性薄膜封装技术被广泛研究。本文通过 ALD 技术与 CVD 技术结合的方法封装 OLED, OLED 在高温高湿加速老化环境下 (60 °C/90%RH) 器件寿命达到 500 小时以上, 并自主研发了基于 Ca 电化学的薄膜水汽透过率测试设备, 定量的表征了薄膜的水汽透过率, 高温高湿下 (80 °C/60 %RH) 基于 ALD 技术制备的氧化铝薄膜的水汽透过率可以达 $10^{-5} \text{ g/m}^2/\text{d}$ 。最后研究了基于 ALD 技术的薄膜光子晶体 OLED 微腔结构设计和制造, 通过 ALD 技术制备有机/无机纳米叠层结构, 建立了基于薄膜光子晶体的 OLED 微腔模型, 实现了 OLED 微腔结构精准制造, 半高宽从 72 nm 降低到了 12 nm。

关键词: 有机发光二极管, 薄膜晶体管, 薄膜封装, 原子层沉积

D05-61

高 k 弛豫铁电聚合物栅极有机薄膜晶体管

李金华

湖北大学材料科学与工程学院

近年来, 有机半导体材料经历了快速发展, 特别是可溶液法制备的有机薄膜晶体管(OTFT)的最高迁移率已经超过 $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, 超过无定形硅, 可广泛应用在柔性电子电路、传感器、显示技术等方面。然而, 由于缺乏合适的介电栅极材料, OTFT 在低操作电压方面仍遭遇极大的挑战。

弛豫铁电三元聚合物 P(VDF-TrFE-CFE) (56/36.5/7.5 mol%)的相对介电常数在低频下高达 60, 高于目前在 OTFT 中使用的栅极电介质材料。我们将这种高 k 聚合物电介质用在 OTFT 中, 可以有效的使器件的操作电压降低到 3 至 5 V, 并获得高的沟道电流。进一步发现, 在 P3HT、PBTT 这类有长侧链、且薄膜呈 edge-on 取向的薄膜晶体管中, 相对于低介电常数栅极 PMMA、PS, P(VDF-TrFE-CFE)用作栅极时, 器件的迁移率可以提高 2-5 倍。而在 face-on 取向的 P(NDI2OD-T2)薄膜晶体管中, P(VDF-TrFE-CFE)栅极器件得到的迁移率要比低 k 栅极器件低很多。进一步地研究表明, face-on 取向的 P(NDI2OD-T2) 与高 k 电介质栅极之间存在强 Fröhlich 极化子效应, 导致载流子迁移率下降。

为了减小高 k 栅极与有机半导体之间的强相互作用, 我们在绝缘栅极与半导体层之间引入一层低介电常数的界面层。低 k 界面层能有效减小电介质与半导体之间强的相互作用, 在低的工作电压下, 可以获得高的电学性能。高 k 弛豫铁电聚合物 P(VDF-TrFE-CFE)可以用在不同的半导体晶体管中, 有效的降低操作电压, 有望应用在可穿戴电子中。

关键词: 有机薄膜晶体管, 高 k 栅极, 弛豫铁电聚合物, 低工作电压

D05-62

分子材料薄膜的物性耦合与传感应用研究

李立强, 徐泽洋, 黄忆男, 陈小松

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

分子材料具有独特的光、电、力、热、磁等性质, 各个物性之间的高效耦合是现实多种功能应用的重要基础, 例如, 力电耦合是实现力学传感的基础, 热电耦合能够实现温度传感, 基于光电耦合可构筑光探测器。但如何实现各个物性之间的高效耦合存在着巨大的挑战。在本人的报告中, 将以分子材料薄膜的力电耦合和热电耦合为例, 重点介绍如果通过调控分子材料的分子结构、组装方式、微观形貌、掺杂方法等措施实现高效的力电和热电耦合, 进而构筑出高性能的应力、应变、气流、温度传感器。

关键词: 分子材料, 力电耦合, 热电耦合, 传感器

D05-63

Two dimensional host-guest architectures with a covalent framework as host

雷圣宾

天津大学

D05-64

有机光电材料的晶体工程

甄永刚¹, 何平¹, 张宗鹏¹, 纪德洋¹, 胡文平^{1,2}

1.中国科学院化学研究所

2.天津大学

为了深入揭示有机光电材料分子结构-聚集态结构-光电性能的关系, 主要围绕有机光电材料晶相/固溶体/共晶生长机制、自组装、掺杂等方面展开研究。1) 利用溶液过饱和度、气相扩散温度梯度、界面纳米沟槽等诱导效应, 实现了有机半导体晶相的调控, 获得了堆积结构紧密的单晶或晶态膜, 构筑了电荷传输性能优异的场效应晶体管, 迁移率高达 $30.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。证实了非简并(HOMO-1)轨道电子耦合作用对电荷传输具有重要的贡献; 说明了分子层间的电子耦合作用对于电荷输运具有重要的干扰作用。2) 通过水氧掺杂和质子掺杂的方法, 利用电荷转移机理, 获得了高导电的自由基有机微晶和纳米线, 实现了电学行为的可逆调控, 开关比可达 2700, 电导率可达 19 S cm^{-1} 。3) 结合原位加热等共组装手段, 获得了吸收光谱更宽的有机固溶体和分子尺度 p-n 异质结共晶, 并首次应用于有机太阳能电池, 调控了激子的行为, 为材料的多功能化发展提供了一类非常重要的方法策略。

关键词: 有机半导体, 光电性能, 晶相调控, 掺杂, 组装

D05-65

一些钯催化材料制备反应的机制研究

党延峰

天津大学

D05-66

有机半导体热电性质的场调控

狄重安

中国科学院化学研究所

载流子输运是有机场效应晶体管(OFET)中最为关键的物理过程之一, 典型的 OFET 运输性质研究关注于单一条件下的运输性质表征, 而面向有机半导体多功能化的运输性质研究则是研究有机半导体在复合条件下的运输特性及其对有机半导体功能性质的影响。热电转换是有机半导体的重要功能性质之一, 有望催生新的分子材料应用领域。本文结合有机场效应晶体管的场调控, 发展了高效发展高性能有机半导体热电材料的新方法。通过在有机场效应晶体管的垂直和水平方向建立电场与温场, 实现电场对有机半导体电导率和塞贝克系数的调控, 研究相关材料在温场驱动和电场调控下的载流子输运性质, 为有机半导体材料热电性质研究提供新途径。基于该策略, 我们建立了 OFET 多功能性质研究平台, 成功实现了电场和温场的同时精确创建与测量, 结合化学掺杂验证了上述方法的可靠性。更为重要的是, 该方法可以突破有机半导体化学掺杂普适性差的局限, 实现系列高迁移率半导体的可控电致掺杂, 从而研究有机半导体热电性质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。利用这一策略, 我们研究了系列高迁移率有机半导体材料的热电性质及其分子构效关系, 成功发展了多个高性能有机热电材料体系, 其中 n 型小分子材料的最高功率因子达到 $236 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。上述研究为高性能有机热电材料的发展提供了新思路, 并为功能性有机热电器件的构建奠定了基础。

墙展

D05-P01

石墨烯的可控制备及其性能研究

于贵

中国科学院化学研究所

石墨烯作为完美的二维原子晶体具有独特的机械、光学和电学性能, 已引起了人们的广泛关注。为了提高石墨烯器件的电学性能, 开展石墨烯单晶可控生长的研究具有重要意义。我们以液态铜为催化剂, 采用化学气相沉积的方法生长了石墨烯, 得到了高质量单晶石墨烯, 实现了石墨烯的层数和形貌的调控。通过控制生长条件, 包括碳源的流速、生长温度和生长时间,

获得五角石墨烯、六角石墨烯、七角石墨烯、十二角石墨烯、圆形石墨烯、石墨烯阵列、双层石墨烯和三层具有级次结构的石墨烯，对其生长机理进行了研究。为了降低阵列中石墨烯的尺寸，采用原位刻蚀的方法制备了亚微米的石墨烯阵列，它是先生长单晶石墨烯或石墨烯薄膜，再用氢气对其进行刻蚀，构筑了石墨烯场效应晶体管器件，对其电性能进行研究。同时，采用常用的 CVD 方法制备了直立石墨烯，它是平面生长几层石墨烯，再直立生长石墨烯；所生长的直立石墨烯具有优异的场发射性能。在此工作基础上，原位生长了石墨烯网络结构，表现出优异的电催化水产氢性能，其电催化活性与商用的 Pt/C 的相对。

关键词： 石墨烯，化学气相沉积，可控制备，电催化，场发射

D05-P02

一种新型的胶体晶体制备方法及其机理研究

邵婷，杨春，罗炫，叶鑫，孙来喜

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

胶体晶体是一类由一种或多种单分散胶体粒子组装并规整排列而成的二维或三维有序结构，它既可以作为制备光子晶体的模板，本身也是潜在的光子晶体，因而在相关领域具有非常重要的应用。目前制备胶体晶体的方法主要有气液界面组合法、重力沉降法、离心沉降法、溶剂蒸发法、垂直沉降法和旋涂法等。这些方法的共同缺点是制备过程要进行比较严格的控制，对操作者有较高的要求，可重复性差；且制备过程耗时长，产量低，难以进行批量化制备。

本研究提出采用冷冻干燥法用于制备胶体晶体，并系统研究了前驱体悬浮液中胶体粒子的浓度、相互间斥力、胶粒尺寸等因素对有序结构及胶体晶体光学性能的影响，分析提出了胶粒有序自组装的机理。与现有方法相比，该方法无须对相关参数及具体制备过程进行严格精确控制，步骤简单，操作方便，操作范围宽，可大范围任意调节单次处理量及相应产量，容易实现批量化制备。且得到的胶体晶体具有自支撑能力，无须依附于基底而存在，非常便于储存与转移，增加了其进一步应用的灵活性。

关键词：胶体晶体，简便高效，固化，有序自组装

D05-P03

可溶液加工纳米聚格的设计合成及晶体管存储器

余洋¹，卞临沂¹，解令海¹，黄维^{1,2}

1.南京邮电大学

2.西北工业大学

有机共轭聚合物表现出可调控的光电特性，并广泛应用于发光二极管、场效应晶体管、太阳能电池、存储、忆阻、光探测器以及激光等领域。科学研究从分子设计、薄膜外部条件调控、机理与理论以及器件层面等，已经取得了丰硕的成果，但是聚合物半导体器件的性能距商业化的应用仍有距离。器件性能的复杂性源于分子材料性质、分子链的排列方式、薄膜形貌等多角色的协同作用，然而聚合物的链构象多态进一步增加了系统复杂性，这成为聚合物半导体领域的巨大挑战，从分子结构设计角度，设计一种可溶液加工的刚性纳米聚合物材料有望抑制构象复杂度，进而解决上述问题。

π 共轭体系的闭环聚合物，具有更小的回转半径与流体力学体积、更低的熔体粘度与更高的热、化学稳定性，还能借助自身结构骨架以及多孔的特性巧妙地调控聚合物的光电性质。纳米聚格是由一系列具有纳米尺度的方形闭合的聚合单体以共价键的连接方式延伸出的一类聚合物。我们利用 Friedel-Crafts 反应构筑以二噻吩基苯并噻二唑作为桥连单元和寡聚芴作为共轭主链的 D-A 型闭环“口”字形单体，共聚苯并二噻吩基衍生物，成功合成一类给受体型纳米格子一维聚合物。该聚合物片段具有特有的环状刚性骨架结构，可以引入可溶性侧基，且共轭主链和桥连基团具有可拓展性。该纳米聚合物在稀溶液和薄膜状态下表现出相同的吸收和发射，动态光散射和静态光散射实验表明该聚合物具有刚性的链构象。这种刚性骨架结构和机械特性可以有效抑制聚合物凝聚态时的链卷曲现象，从而有望克服成膜器件的缺陷、稳定性等问题，同时有序规则排列的凝聚态可以有效提升器件参数。我们把该纳米聚合物应用于有机场效应晶体管存储器的电荷存储层，并同时设计了具有相同片段的线性聚合物作为对比，两种聚合物具有相同的 HOMO/LUMO，但基于纳米聚合物的器件表现出更高的迁移率和更大存储窗口，更为重要的是，纳米聚合物特殊的孔状结构提供了限域电荷的中心，使得电荷维持性能较线性聚合物提高了 103。纳米聚合物结合了纳米材料与高分子材料共同的优势，有望简化器件工艺以及解决工艺重复性不好的问题，进一步提高器件的稳定性。

关键词：纳米聚合物，刚性构象，有机场效应晶体管存储器

D05-P04

稳定、高性能聚合物太阳能电池的材料设计

段春晖

华南理工大学

聚合物太阳能电池是一种非常有潜力的新型光伏技术,其发展依赖于新材料的开发。除了进一步提升器件的能量转换效率,提升器件稳定性、降低成本、发展与大面积制备兼容的加工工艺等都十分重要。

以聚合物太阳能电池的实际应用为导向,我们在新型光伏聚合物材料的设计合成方面开展了系列工作。本报告将介绍我们在聚合物光伏材料的合成方法、新型厚膜与低成本给体材料的设计、受体材料新体系、全聚合物太阳能电池材料与器件等方面的工作。

D05-P05

柔性聚噻吩衍生物薄膜热电性能的研究影响

申岚岚^{1,2}, 蒋丰兴^{1,2}, 徐景坤^{1,2}

1.江西科技师范大学

2.江西省有机功能分子研究所

噻吩基聚合物或低聚物由于其独特的电学性质以及可以通过控制掺杂、化学改性、分子堆叠或与其他材料复合的方式改变其机械性能,被人们认为其在未来光学和电子设备中具有巨大的潜在应用。而 PEDOT 作为最为典型的噻吩基聚合物之一,由于其高电导率及良好的环境稳定性,成为近年来导电聚合物的热点之一。但 PEDOT 作为热电材料由于其本身的 Seebeck 系数较低,限制了它进一步广泛应用。我们合成了一系列的噻吩衍生物(EDOT-ThR-EDOT),目的是希望噻吩基团的引入能够在保持 PEDOT 的高电导率的情况下,一定程度上改善薄膜的 Seebeck 系数。并通过化学氧化聚合的方式在室温下制备导电聚合物薄膜。我们分别采用了普通玻璃、PET、PVA、PDMSS、PVDF 等材质作为薄膜基底。实验结果表明,采用 PVDF 作为基底不仅能够使得聚合物附着具有很好的成膜性能,而且能够使得薄膜实现柔性。在此基础上,对单体溶剂、单体浓度,氧化剂的量进一步优化调控薄膜的热电性能。优化后的薄膜在具备好的柔韧性的基础上,薄膜的 Seebeck 系数可以增大为原来的 200%。除此之外还探究了不同烷基侧链长度对聚合物薄膜热电性能影响。发现随着烷基侧链长度的增加,Seebeck 系数增加(最大可以达到 23.8 S/cm)。柔性聚噻吩衍生物薄膜的成功制备及其热电性能调控为制备柔性薄膜及噻吩衍生物热电性能的基础研究提供借鉴。

关键词:噻吩衍生物, PVDF, 柔性, 烷基侧链, 热电性能

D05-P06

基于石墨粉的可穿戴式应变传感器的构筑和响应研究

吴波¹, 黄江林¹, 黄鸿兴¹, 林茂华^{1,2}

1.福州大学

2.Florida atlantic university

可实时测量应变(如身体的运动)的传感器已经成为未来的可穿戴技术的基础。但是,找出能够经得起较大应变的柔性、可降解、价格低廉的应变传感器,例如测量弯曲的肘部或者紧握的拳头,已变成一个棘手的问题。本报告报道了一种高柔性、高稳定性、可降解、及价格低廉的基于石墨粉的柔性可穿戴式应变传感器的构筑和响应特性。

首先,将适量羧甲基纤维素、石墨粉和去离子水混合搅拌,制备出一种浓稠糊状石墨胶然后通过丝网印刷法将上述石墨胶印刷在柔性纸上,干燥后得到涂覆了感应层的柔性纸,最后沿感应层长度方向连接电极和电极固定单元,感应层上方有粘结剂的胶布粘帖获得应变传感器。测试结果表明:与最近的其他文献报道的 Pen-on-Paper 和 Printable Paper-based Strain Sensors 法制备的传感器相比,本研究制备的应变传感器具有创新性发现和性能突破:

1) 传感器数据监测稳定可靠,不存在零点漂移。将纸基应变传感器穿戴在人体手指关节处监测手指关节的运动,10000 次 bending-unbending 测试,传感器不存在零点漂移,响应时间由原先报道的 110 ms 缩短至 20-60 ms,数据监测非常稳定可靠,能周期性稳定呈现手指关节运动,且能更加准确检测弯曲角度。

2) 感应层初始电阻呈现类似金属电阻特性。感应层电阻与长度呈正向线性相关,与宽度呈负线性相关。随印刷道次的增加,电阻值随印刷次数的增加而减小,当印刷达 20 次后,感应层绝对电阻值几乎维持不变。

3) 感应层内部是微米级的石墨颗粒互相接触形成导电通道。单独的石墨颗粒内部石墨层薄片致密排列,石墨颗粒边缘

呈现类石墨烯片层，电子在微米级石墨颗粒内部转移电阻很小，感应层电阻的变化主要来自于外界变形造成微米级石墨颗粒与颗粒之间裂纹和空隙接触变化，裂纹和间隙的存在限制电阻不能无限减小。

当感应层发生弯曲变形，内部空隙和裂纹变大，电阻变大；感应层回复自由态，空隙和裂纹减小，回复到原先的自由态，所以当外界形变时，传感器通过内部空隙和裂纹的变化导致电阻变化来获得感应。

D05-P07

基于碳基纳米复合材料的太阳能光热转化

王贤保

湖北大学材料科学与工程学院

日益严重的环境恶化、气候异常和能源短缺，使开发利用新型、高效清洁的太阳能资源成为本世纪的科学面临的重大挑战课题。如何将低品位、分散不连续的太阳能转换成高品位的热能，以便最大限度地利用太阳能，成为突破太阳能光热应用的关键瓶颈。本工作设计合成一系列具有高效稳定光热转换性能的碳基纳米复合材料，通过吸收太阳能，将水迅速汽化成水蒸气，开发太阳能蒸汽技术，直接将低品位的太阳能转换成高品位的、应用价值巨大的热能和蒸汽能。这种太阳能蒸汽技术可以将 80% 的太阳能转化成蒸汽能，与当前的蒸汽涡轮机（24%）和太阳能电池光伏发电（15%）相比，具有极其重要的科学研究价值和十分巨大的市场开发前景。本工作可为简捷高效地利用太阳能资源提供一个全新的技术，初步探明太阳能蒸汽技术在污水处理、海水淡化等领域的应用前景。

关键词： 石墨烯，纳米复合材料，太阳能蒸汽，光热转化性能

D05-P08

Cu/Ni 基底表面生长二维六方氮化硼及其紫外探测性能研究

杨慧慧¹，高峰¹，王立锋²，戴明金¹，陈洪宇¹，胡平安¹

1. 哈尔滨工业大学 微纳米中心

2. Institute for Frontier Materials, Deaking University

紫外探测器在天文研究、火焰探测、导弹预警、生物与化学分析以及紫外通讯等领域具有广泛的应用需求。目前所报道的紫外探测器大部分是基于 $(\text{In}, \text{Al})_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, $\text{Zn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{O}$, SiC, 金刚石等宽禁带半导体材料。然而，针对于波长在 280-200 nm 范围内的真空紫外光（UV-C 波段）的光电探测器报道较少。六方氮化硼（h-BN）的禁带宽度接近 6 eV，恰好与 UV-C 波段的能量一致，是一种理想的紫外探测器材料。事实上，基于 h-BN 多晶薄膜的紫外探测器性能的研究已经出现了很多报道。其性能参数包括响应度以及响应时间均有待提高。这可能是由于多晶薄膜材料的晶体质量较差，表面的缺陷与晶界严重的影响了光生载流子的效率与寿命。采用晶体质量较高的单晶 h-BN 作为紫外响应的沟道材料，可以大幅提高其紫外探测器的性能。

近几年来，二维材料的研究热潮推动了多种二维材料的制备方法的研究进展。其中一种比较普遍的制备方法是化学气相沉积方法（CVD）。采用这种方法可以制备得到晶体质量较高的，具有三角形形状的单晶 h-BN。但该生长过程中仍存在诸多问题，例如 h-BN 成核密度的调控与晶体形貌的控制等。为解决上述难题，我们课题组相继开展了一系列的研究工作：首先我们在铜箔上生长得到了大量的三角形单晶 h-BN，通过调节生长过程中的比例气氛，可以有效的控制成核密度，获得不同形貌的 h-BN 单晶。所生长得到的 h-BN 作为石墨烯等二维半导体材料的介电层，可以大幅提高二维半导体的迁移率。同时，我们发现以 Cu/Ni 合金作为 h-BN 的生长基底也可以有效降低成核密度，并可以得到不同形貌的单晶 h-BN。基于这种方法制备的单晶 h-BN，我们构筑了深紫外探测器。该器件具有极低的暗电流 (9×10^{-13} A)，在 210 nm 处响应值高达 5.45 mAW^{-1} ，响应时间约为 198 ms。值得指出的是基于单晶 h-BN 的深紫外探测器目前仍未见相关的报道。与目前报道的深紫外探测器相比，我们所制备的器件性能十分优越，这为新型深紫外光电探测器的进一步发展提供了一种新的可能。

关键词：氮化硼，紫外探测

D05-P09

基于杂原子掺杂碳材料的电化学传感器催化活性位点调控

司维蒙，曹悦，亓云龙，孟小桐

山东理工大学

杂原子掺杂的石墨烯被越来越多的应用于储能、催化、传感等领域，体现出独特的性能。利用氮掺杂石墨烯的掺杂氮原子所带来的独特的电荷特性和配位性能，我们实现了 hemin 分析的高效负载，具有高吸附量和高的电荷传递效率，实现

高性能的过氧化氢传感器的构建。另一方面,我们将传统的 hemin-N-C 体系中引入硼原子,实现过氧化氢检测的同时,具有接近 Pt/C 的 ORR 特性,该材料中 hemin 以分子态存在,而非高温煅烧后的复杂铁基复合材料。事实上,在 ORR 领域杂原子掺杂石墨烯的催化性能有较多的研究,而在电化学分析领域,因更加复杂的反应及复杂的吸附过程,使得研究催化位点、催化机理更为复杂。我们也试图分析常见的酚羟基和硝基的电化学氧化还原行为,分析不同 N 化学位置不同的催化行为。通过测试,认为在硝基的电化学还原中,氧化吡啶 N 的存在具有重要的作用,少量的存在即可显著提高催化性能;而在酚羟基的氧化中,石墨 N 能够提高电荷传递的速度,从而一定程度上提高响应。

关键词:杂原子掺杂,电化学传感器,催化活性位点

D05-P10

柔性 PEDOT:PSS 水凝胶热电薄膜

罗婵^{1,2}, 蒋丰兴¹, 徐景坤¹

1.江西科技师范大学

2.江西省有机功能分子研究所

作为一种新型的功能材料,导电水凝胶已经引起广泛的关注,但是对于热电水凝胶的研究仍然没有。本研究通过将导电 PEDOT:PSS 嵌入 PVA 水凝胶网络中,制备得到 PEDOT:PSS 水凝胶薄膜。实现了材料的高柔性以及导电,并且具有一定的机械强度。首次探究了在不同 PVA 含量下, PEDOT:PSS 水凝胶薄膜的热电性能,发现在较低 PVA 含量下电导率能够实现 2 个数量级的提升。随后对其进行 EtOH、EG、DMSO 浸泡后处理,发现这些溶剂仅对低 PVA 含量的 PEDOT:PSS 水凝胶薄膜的热电性能有一定的影响。通过 UV-vis、FTIR 等表征可以证实 PEDOT:PSS 与 PVA 产生了相互作用,使得其电导率提高。本研究为热电材料的发展提供了一种新的途径。

关键词:水凝胶,热电, PEDOT:PSS

D05-P11

面向人体健康监护的多功能可穿戴传感器研究

徐华

东南大学

近年来,利用柔性可穿戴设备来监测人体的健康信号在个体化健康监护和预防医学中都具有极大的应用潜力。各种基于不同材料和结构的可穿戴设备已被开发用于各种人体健康的监测研究,如脉搏、心率、体温、呼吸频率等以及体液及呼气的生物标志物分子。由于单一的健康参数很难准确地判别人体的健康状况,同时在线监测多个健康数据,尤其是生理信号和生物标志物的同时检测变的更为重要。最近,我们开发了一种基于石墨烯材料的多功能可穿戴式传感阵列,实现了对呼气中 VOC 标志物和生理信号的同时监测。该传感阵列主要由两部分构成:上层是由四个卟啉修饰的还原氧化石墨烯(rGO)薄膜组成的气体传感阵列,利用阵列的电学信号变化结合模式识别技术实现对呼气中 VOC 标志物的辨别和分析;下层是由多孔的石墨烯薄膜构成的应力响应层,用于对人体的脉搏、呼气频率等生理信号的实时监测。并将开发的传感阵列用于区别糖尿病患者和健康人,及监测人体的脉搏、呼气频率等。

此外,我们将还原氧化石墨烯薄膜集成在多孔微结构的三维反蛋白石乙酸纤维素来构建高灵敏的多功能可穿戴式传感器,用于同时在线监测人的运动及运动中的汗液情况。在该传感系统中,还原氧化石墨烯薄膜通过滴涂氧化石墨烯成膜再还原来制备,并用作应力传感层来监测人的运动。而反蛋白石乙酸纤维素通过复制氧化硅胶晶体模板来制备,其不仅用于微结构基底来实现高灵敏的运动检测,同时用于收集和分析人运动中的汗液情况。通过将该多功能传感器贴附在人体的不同部位,利用石墨烯的电学变化可以实现对人体的不同动作的监测和区分,如不同方向的手腕弯曲,不同方向机不同强度的头部转动以及人的喉咙运动等。利用反蛋白石乙酸纤维素的颜色和反射光谱变化可以实现对这些运动中的汗液 NaCl 的同时在线监测。本研究开发的多功能传感器可以实现对汗液中 80 到 680 mM 范围内 NaCl 含量的监测,具有很强的实际应用性。

关键词:多功能可穿戴式传感器,石墨烯材料, VOC 标志物检测,汗液,生理信号检测

D05-P12

萘酰亚胺衍生物构筑的聚集态诱导室温磷光分子的光电性能研究

陈硕, 林鹏举, 曾鹏举

深圳大学

有机电致发光二极管(OLED)作为下一代固态显示器件正逐步代替传统光源成为新型的显示方式。其中,发光层分子在固体时的荧光量子产率对 OLED 器件的外量子效率起到至关重要的作用。为了避免发光分子的聚集态浓度猝灭(ACQ),通过分子内旋转或振动受限产生的聚集态诱导发光(AIE)由唐本忠院士首次提出。基于上述思想,我们利用萘酸酐 C-4 位点连接给体 N-芳基单元,萘酰亚胺作为受体单元和位阻给体基团组成了具有 D-A 构型的 AIE 红光分子 NAI-BiPhFA 和橙光分子 NAI-Ph-BiPhFA。萘酰亚胺具有的刚性骨架有利于分子热力学和结晶学稳定性,其分解温度和玻璃态转化温度分别为 480 °C 和 166 °C,同时萘酰亚胺连接的给体单元使分子具有聚集态诱导发光性质,通过不同比例的 THF/H₂O 混合溶剂证明了两分子具有 AIE 特性。同时,两分子具有显著的溶剂变色行为,随着溶剂极性的增加,化合物的最大发射发生从天蓝色(480 nm)红移至红色(605 nm),证明了分子在激发态存在电荷转移 CT 模式。值得一提的是,NAI-BiPhFA 和 NAI-Ph-BiPhFA 在室温下的平均寿命分别是 7.68 μs 和 9.09 μs,该微秒级的寿命属于磷光,证明两分子属于室温磷光分子(RTP)。利用 NAI-BiPhFA 和 NAI-Ph-BiPhFA 作为 OLED 的发光层,通过对器件结构的优化确定最优器件结构为 ITO | HATCN (15 nm) | TAPC (40 nm) | TCTA (5 nm) | x wt%-emitter:mcp(20 nm) | B3Pympm(40 nm) | LiF(1 nm) | Al(150 nm)。实验证明 NAI-Ph-BiPhFA 以 20 wt%浓度掺杂在主体材料 mcp 中的 OLED 器件具有最佳的光电性能,其中最大 C.E.=27.23 cd A⁻¹,最大 P.E.=26.72 lm W⁻¹,最大 E.Q.E.=8.47 %。以 NAI-BiPhFA 做为非掺杂器件的发光层,尽管器件的效率较低,其 CIE 色坐标值 (0.65, 0.35) 接近美国国家电视系统委员会 (NTSC) 的纯红光标准 (0.67, 0.33)。我们的工作对于构筑同时具有 AIE 和 RTP 特性的分子开辟了新的指导。

关键词:萘酰亚胺衍生物,聚集态诱导发光,室温磷光,有机电致发光器件

D05-P13

高能量偶氮基太阳热燃料的研究

冯奕钰,符林霞,杨伟翔,封伟

天津大学

以蒽、降冰片二烯和偶氮苯为代表的有机分子化合物体系被认为是一种存储利用太阳能的有效途径。该体系通过光致异构化将能量储存于化学键中并在光照、加热等外界刺激下将化学键中的能量以热的形式释放出来,其中偶氮苯类及其衍生物由于价格便宜,不易降解等优点在上述体系中脱颖而出。不过偶氮苯小分子存在储存能量较低 (< 50 kJ/mol),半衰期较短(几分钟到几小时)等问题极大的限制了偶氮苯作为储能材料的应用。目前可以通过将偶氮苯共价接枝到石墨烯模板的方法对这些问题进行解决,但是由于其接枝率不高,分子间相互作用不足等原因限制了偶氮苯-石墨烯储能体系的发展。

针对该问题,本文以石墨烯为模板,设计并合成了具有二/三枝结构的磺酸基偶氮苯衍生物。相比于单枝偶氮苯分子,二/三枝结构的偶氮苯分子具有更大的空间位阻。同时,由于磺酸基的存在,可以使偶氮苯分子之间形成分子间氢键。这些都极大的提高了偶氮苯/石墨烯复合体系的能量密度和半衰期。同时,我们通过重氮自由基反应将偶氮苯共价接枝在石墨烯表面,并通过多次接枝的方式对偶氮苯在石墨烯上的接枝率进行调控。结果显示,材料在接枝密度为 1:68 时达到最大的能量密度 (131 Wh/kg),这是目前国际上分子储能材料所能达到的最高值。同时二/三枝偶氮苯分子半衰期为 1250 小时,功率密度为 3036 W/kg,并且在循环 100 圈之后没有出现明显的性能衰减。这些都表明二/三枝偶氮苯/石墨烯复合材料是一种很好的储能材料,并且其在强紫外,低温等极端条件下有很大的发展潜力。

D05-P14

有机复杂微纳结构的可控制备及其光学器件研究

王雪东

苏州大学

The homo-/hetero-structures are of essential importance for the multiple input/output and the wavelength division multiplexing system in the optoelectronic circuits. However, the widely used preparation method, e.g. micromanipulation, usually lead to the simple and instable physical contact. Herein, through the “bottom up” approach, we have successfully fabricated the organic homo-/hetero-structures based on the o-BCB and perylene single crystals, whose formation can be attributed to the low interplanar spacing mismatch rates, which are 2.2% for the homo-structure and 4.1% for the hetero-structure. More importantly, the multiple input/output channels have been demonstrated in the photonic devices base on the homo-/hetero-structures, which also exhibit the novel asymmetric waveguide mode in homo-structure and the switchable transmission signals (green or yellow light) at the same output channel in hetero-structure. Our work exhibits the highly potential of the novel organic homo-/hetero-structures being applied

in the miniature multifunctional organic integrated photonics circuits.

关键词：有机小分子，发光材料，微纳晶体，光波导，有机激光

D05-P15

基于有机半导体薄膜的 NO₂ 超灵敏气体传感器

黄丽珍，王滋，迟力峰

苏州大学

以有机半导体为活性层的气体传感器由于其可室温工作、良好的选择性、工艺简单和柔性等特点而具有极大的应用潜力。然而和传统无机半导体传感器相比，有机半导体气体传感器的响应性能却远远不及。为了解决这些问题，大量的研究都相继开展，但是其性能和机理的认识依然还远远不够。我们团队报道了一种超灵敏的 NO₂ 有机半导体气体传感器，采用真空气相沉积制备的 TIPS-pentacene 分子超薄膜为活性层。当 NO₂ 浓度(体积分数)为 1-5 ppm，其灵敏度高达 1000 %/ppm，响应回复时间均在 2 min 以内，最低检测限可达 20 ppb。通过结合器件物理电学参数分析以及变温电输运和形态分析得出该气体传感器的超灵敏性能主要归因于：(1)薄膜较高的迁移率和较低的初始载流子浓度；(2) 分子本身较低的 HOMO 能级使得其不容易被空气掺杂，从而可以维持一个较低载流子浓度的状态。该研究为传感器器件性能的进一步提升提供了一种新思路，也为进一步了解传感器传感机理提供了方法。

关键词：有机半导体薄膜，气体传感器，薄膜晶体管

D05-P16

分子间电荷转移作用促进苯乙烯吡啶 - 四氰基苯共晶体中的双光子吸收性质

孙玲杰¹，朱伟钢²，张小涛¹，胡文平¹

1.天津大学

2.中国科学院化学研究所

通过分子间非共价键组装形成的有机共晶，与单组分晶体材料相比，能够有效的实现有机半导体的多功能应用，并展现出更多新颖的宏观光电性质，尤其在非线性光学特性方面引起了科学家们广泛的关注。此外，有效的共晶化相对传统的分子设计和合成方法来说具有高效且简便等特点，但作为一个新的研究领域，有机共晶仍存在问题与挑战需要我们去深入探索和研究。最近，我们通过超分子自组装方法制备了 4-苯乙烯基吡啶和 1,2,4,5-四氰基苯的共晶。组分分子之间的给受体相互作用是自组装的主要驱动力，并且促成了分子间的电荷转移。共晶具有双光子吸收特性，而这在单个组分中并未观察到；实验中通过单晶结构解析、光谱研究等手段表明共晶中的双光子吸收性质是因为给受体系统中的分子间电荷转移作用导致的。多发色团体系中双光子吸收的起源仍未得到充分研究；因此，该系统通过共结晶提供了罕见的双光子吸收示范。进一步表明了共晶工程可以为设计和开发非线性光学和光电应用的新材料提供新策略。

关键词：有机共晶，电荷转移，双光子吸收性质

D05-P17

液滴操控纳米材料多维组装图案化及器件制备

苏萌，宋延林

中国科学院化学研究所

纳米材料精细图案化组装在功能器件的制备中有着重要意义，传统的微纳图案制备方法存在步骤繁琐、组装材料有限、成品效率低、结构单一或图案精度低等缺点。在液体表面，纳米材料可以有效组装为大面积、具有规则取向的阵列结构。从纳米功能材料的多维组装图案化研究出发，以含有功能化纳米材料的液体多维操控为核心，发展了构建多维微纳图案的简单方法。

针对可穿戴智能电子设备对健康实时监控的巨大需求，从构效关系出发，设计利用液滴操控技术，控制银纳米颗粒的自组装成形貌多样的银纳米曲线。在柔性的基底上构建纳米导电曲线阵列芯片，贴付于被监测者的体表皮肤，进行数据采集与分析，实时监测人在不同环境和心理条件下，体表微形变的相关生理反应；其可用于表情识别、脉搏监测、心脏监护、远程操控等可穿戴传感领域。

受蚂蚁、蜜蜂和萤火虫等群体智慧的启发，围绕着线路的优化设计，申请人提出了自组织结构思路。通过模仿蚂蚁以最低能量消耗的方式运动，构造了材料液滴的自发收缩模型，使其在蒸发过程中的结构符合数学规律，实现节点间最短线路的

连接,从而实现以自然简便的方式制造最优的微纳线路。以此为基础,使含有纳米颗粒的溶液自然形成热力学上最低表面能的状态,其对应的就是数学上所有节点间最短连接,从而实现了最优微纳线路的印刷制造。与传统平行线相比,新线路构造减少了 65.9%的电磁干扰,找到了解决困扰芯片发展极限的电磁干扰难题的新途径。

为应对传统集成电路的集成度和生产工艺所面临巨大挑战,解决传统微纳制造方法难以实现自支撑的三维悬空结构、所适用的材料十分有限等难题。申请人以液滴操控微纳结构立体成型为研究出发点,利用模板诱导液滴在三维空间内自发收缩,实现了单一或多材料的三维微纳结构的快速组装成型。基于银纳米颗粒的立体微纳电路显示了在立体集成电路的潜在应用,基于两种量子点共组装的三维微纳结构在间隔小于 3 μm 时仍能实现良好的多色显示,为新型立体光电器件的发展提供了新的思路。

关键词:液滴操控,纳米材料,多维组装,器件制备

D05-P18

新型热活化延迟荧光材料的分子设计及其性能研究

龚少龙,曾维旋,吴凯龙,杨楚罗

武汉大学

近年来,热活化延迟荧光(TADF)材料引起了学术界和产业界的广泛关注,被认为是最具有应用潜力的第三代发光材料。目前,部分基于TADF材料的OLEDs获得了能与第二代重金属磷光材料相近的器件性能,但是高效的TADF材料体系较少,长波长TADF器件性能较差以及大部分TADF器件的效率衰减较快等是目前TADF材料和器件亟待解决的难题。

我们团队采用兼具刚性和大共轭平面的电子受体1,8-萘二甲酰亚胺单元,构建了两个橙红光TADF材料。它们都获得了显著的TADF特性,高的发光量子效率和较好的水平跃迁偶极矩取向性,在OLED中获得了高达29.2%的外量子效率,是目前报道的橙红光TADF器件的最高值。另外,我们将TADF分子设计策略引入到具有激发态分子内质子转移(ESIPT)特性的分子体系中,构建了一系列兼具TADF和ESIPT特性的荧光分子。它们在固态下获得了较高的发光量子效率和合适的延迟荧光寿命,在OLEDs中获得了超过20%的外量子效率,是目前报道的基于ESIPT发光材料的OLED的最高值。

关键词:热活化延迟荧光材料,激发态分子内质子转移,有机电致发光器件

D05-P19

利用组分空间分布管理策略组装高效的钙钛矿发光二极管器件

魏展画

华侨大学材料科学与工程学院

钙钛矿材料有荧光量子效率高、颜色可调、发光半峰宽窄、易制备和成本低等优点,非常适合于LED应用,在显示和照明领域有巨大的应用潜力。但是,目前钙钛矿LED的外量子效率不到15%,这主要归结于两个关键原因,即器件内电子和空穴注入速度不平衡和钙钛矿薄膜自身辐射复合效率低。基于前期研究成果,我们提出组分空间分布管理策略并用于组装高效钙钛矿LED器件。首先,将组分空间分布管理策略用于指导制备不同空间分布结构的钙钛矿薄膜,并探究空间结构和荧光量子效率间的内在联系;然后在电荷过剩界面插入阻挡层的方法平衡电子和空穴的注入速度,并探究电荷注入平衡情况和器件性能的内在联系;最后组装钙钛矿LED器件并评估性能,开展长期稳定性测试,探究器件的失效机制。目前,基于组分空间分布管理策略我们制备得到高荧光量子效率(~80%)的CsPbBr₃薄膜,并通过器件结构的优化,成功地将器件的EQE提高到了20%。

关键词:发光二极管,钙钛矿,LED

D05-P20

钙钛矿太阳能电池的晶界调控及耐弯折性能研究

谈利承^{1,2},黄增麒¹,刘聪¹,陈义旺^{1,2}

1.南昌大学化学学院

2.南昌大学高分子研究所

有机无机杂化钙钛矿太阳能电池由于其高能量转换效率且成本低廉,成为目前最具有应用前景的光伏技术之一。增加晶体的成核速率、减缓结晶速率,同时提高钙钛矿薄膜的耐弯折性能对于提高柔性钙钛矿太阳能电池的性能至关重要。我们发现通过对钙钛矿前驱体溶液引入高弹性材料聚氨酯,在减缓钙钛矿晶体结晶速率的同时,能够有效提高钙钛矿薄膜的耐弯折

性能。通过这种方法可以获得微观上具有紧凑的微米级晶粒，宏观上光滑透亮的钙钛矿薄膜，且展现出优异的光电性能，使得相应的器件效率高达 18.7%，并且几乎没有光电流迟滞效应，同时在空气中也十分稳定。更重要的是，高弹性聚氨酯能够将相邻钙钛矿晶体之间的晶界粘接起来，形成聚氨酯网络，因此有效地提高了钙钛矿薄膜的耐弯折性能。

关键词：钙钛矿太阳能电池，晶界，结晶，聚氨酯，弯折性

D05-P21

新型共晶光热材料的设计与应用

王雨¹，朱伟钢²，张小涛¹，胡文平^{1,2}

1.天津大学

2.中国科学院化学研究所

有机共晶是由两种或两种以上的分子在分子间非共价键力的作用下自组装形成的多组分分子晶体。双组分或多组分有机共晶不仅可以保留各自组分固有的性质，而且可以通过协同效应和集合效应使得晶体展现出更新颖的光电性质。因而，有机共晶为设计和实现单一晶体的多功能化提供了新的思路 and 策略。近年来，有机近红外光热材料因其低毒性，低成本，稳定性和易于加工性引起了广泛关注，但目前复杂的设计和制备策略限制了有机光热领域的进一步发展，因此开发研究新的设计思路是一个亟待探索的课题。最近，我们利用电子给体和电子受体分子，通过形成共晶，制备了具有红外吸收的二维光热材料，进一步研究表明，给受体间强的电荷转移作用诱导了共晶的红外吸收，而体系中快速的非辐射跃迁过程增强了材料的光热转换效率。此外，该材料可用于具有实时性，时间分辨性，非破坏性的光热成像。

关键词：有机共晶，光热材料，近红外吸收，自组装

D05-P22

基于杂环取代的萘酰亚胺类聚合物展现出超高电子迁移率及空气稳定性

赵志远¹，殷志红²，陈华杰²，郭云龙¹，刘云圻¹

1.中国科学院化学研究所

2.湘潭大学

高迁移率电子传输类聚合物半导体是构造有机互补电路等光电子设备的关键功能材料，然而该类材料及其薄膜场效应晶体管（OFETs）器件依然面临着成膜性差、电子迁移率低和器件稳定性差等挑战。因此，开发高迁移率的电子传输型聚合物半导体材料并且构造出空气稳定的 OFET 器件是当前急需解决的一个重要难题。我们运用杂原子工程调控策略调控萘酰亚胺类聚合物半导体材料的成膜性、能级结构、薄膜表面形貌、分子堆积排列模式。基于聚合物薄膜特性构造超厚绝缘层顶栅 OFET 器件结构优化载流子传输性能等参数。研究证实：1）相比噻吩桥连聚合物，硒吩类聚合物具有优异的成膜性，能够形成自支撑的薄膜；2）引入硒吩和氟原子降低了聚合物的 LUMO 能级，增强了聚合物的电子亲和力；3）含硒吩的聚合物薄膜表面粗糙度低，利于构造高性能的顶栅薄膜 OFET 器件；4）在硅衬底上，聚合物薄膜均采取混合堆积模式排列。而且，含硒吩的聚合物薄膜 π - π 堆积距离更短，利于载流子传输。基于退火薄膜构造的顶栅 OFET 器件研究证实：1）相比噻吩类聚合物（PNBT 和 PNBTF），硒吩类聚合物（PNBS 和 PNBSF）的载流子迁移率更高。其中，PNBS 展现出最优的空穴和电子迁移率分别高达 1.7 和 8.5 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ；2）在聚合物主链中引入氟原子以后，其载流子传输特性从双极性电子传输转变为单极性 n-型电子传输特征。其中，PNBSF 展现出优异的单极性电子传输性能，最高电子迁移率高达 3.5 $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ 。由于超厚的顶栅 PMMA 介电层具有良好封盖阻隔水氧的效果，其顶栅 OFET 器件的电子迁移率 100 天几乎不衰减。该工作发表在国际材料化学类顶级期刊《Advanced Materials, 2017, 29, 1602410》上，同时被选为期刊的内封底（Inside Back Cover）。

关键词：萘酰亚胺聚合物，杂原子调控，高迁移率

D05-P23

一种高灵敏度复合型应变传感器的制备与研究

韩宋佳，刘春瑞，刘川

中山大学

近年来，新型一维纳米材料诸如碳纳米管、金属纳米线等在传感器件上的应用使得器件具有柔性轻薄、高灵敏度、低成本、小体积等优点。由此可见，基于新型一维纳米材料与微纳结构的柔性传感器的研究是发展新型高性能电子皮肤的必由之路。虽然已有不少关于研究低维纳米材料的形貌来提高应变传感器的性能，但仍然是很难同时实现高伸缩性和灵敏度。本文

设计并论证了一种基于纳米材料和导电液体的复合结构拉伸应变传感器。该拉伸应变传感器响应区域为 4%到 400%以上，具有高灵敏度和耐久性。该传感器可以在低电压下工作，能够响应不同的机械变形，用于检测各种人体活动。

关键词：应变传感器，一维纳米材料，PEDOT:PSS

D05-P24

嵌段改性的弹性半导体材料的制备及性能

邱龙臻，葛丰，王晓鸿，张国兵

合肥工业大学

聚合物半导体材料因具有高机械柔韧性、适于柔性基板的加工工艺、易于分子裁剪等固有优势，被认为是制作柔性电子的理想材料。但聚合物物如果想要实现高电荷传输效率，通常需要刚性 π -共轭主链和高度有序的聚集结构，导致聚合物半导体材料通常是刚性和脆硬的，很难表现出与工程塑料或橡胶类似的高强度和高韧性特征。聚合物成熟而丰富的改性策略为开发弹性或高延展性的半导体聚合物材料提供了途径。已报道的改善聚合物半导体的机械强度和拉伸性的策略，包括改变分子量和区域规整性、主链和侧链的化学修饰、物理共混以及交联等。我们根据 ABA 三嵌段共聚物热塑性弹性体的原理，设计合成半导体-橡胶-半导体 (SRS) 三嵌段共聚物，以半导体聚合物为硬段，低玻璃化温度的橡胶态聚合物为软段，形成具有高弹性的交联网络结构，有效改善了聚合物半导体的机械性能。1) 应用“点击”化学偶联法制备了聚(3-己基噻吩)-b-聚丙烯酸甲酯-b-聚(3-己基噻吩) P3HT-b-PMA-b-P3HT 三嵌段共聚物，该嵌段共聚物具有高拉伸性，其杨氏模量为 6 MPa，断裂伸长率为 140%，载流子迁移率为 $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，在 60%形变时还可以显示场效应性能。2) 针对偶联法存在合成过程繁琐、产物分离提纯困难等问题，通过“一锅法”简化了合成 P3HT 嵌段聚合物的步骤，并成功精确制备了具有特定嵌段数的聚(3-己基噻吩)-b-聚十六烷氧基联烯-b-聚(3-己基噻吩) (P3HT-b-PHA-b-P3HT) 三嵌段共聚物。3) 为消除绝缘组份对电学性能的影响，利用嵌段共聚物与聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 共混成膜技术，改善了三嵌段共聚物的聚集态结构，提高了薄膜的场效应性能，器件的最高迁移率达到了 $0.045 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，与纯 P3HT 薄膜性能相当。这种新型半导体设计思路与加工方法可能在低成本和大面积可拉伸电子产品中发挥重要作用。

D05-P25

纳米铜线的液相制备及其可穿戴柔性力学传感器的研究

刘春瑞，韩宋佳，刘川

中山大学

一维纳米材料在光学、电学、力学和热学等领域显示出非常独特的性质，尤其是贵金属纳米线，可作为制备透明柔性导电材料的优先选择。纳米铜线是近年来国际科研的前沿领域之一，由于众所周知的低廉价格（相对于金、银等贵金属）和较大的自然存储量，其有望取代贵金属材料。近年来，研究一维纳米铜线的力学性能与电导率的关系，以及延伸到纳米电子器件的功能器件和光电器件，都具有重要科学意义和潜在的实用价值。

本次研究中，我们利用液相还原法（溶剂热法）成功的制备出纳米铜线，通过对其进行形貌表征，验证该方法制备的纳米铜线具有一致性好、可挠性高、分散性好、电阻率低等优点，为接下来以纳米铜线作为导电薄膜层制备柔性可拉伸力学传感器奠定了良好的基础。接着，以 PDMS (polydimethylsiloxane, 聚二甲基硅氧烷) 为柔性衬底，混合 CuNWs (copper nanowires, 纳米铜线) 和 PEDOT (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)) 为导电材料，制备出可穿戴的力学传感器。通过对传感器电学性能和力学性能表征，验证了通过上述方法制备的传感器具有灵敏度高、耐受性强、可多次拉伸等特点，具备成为可穿戴电子器件的潜能。

关键词：铜纳米线，PDMS，柔性力学传感器

D05-P26

二维“H”构型有机半导体材料的合成及其场效应晶体管性能

高建华，陈茹，邹素芬，樊航宏

杭州师范大学

相比一维线型分子，二维构型分子具有平面大共轭结构，更容易通过 π - π 堆积形成分子间紧密堆积，有利于载流子传输。此外，利用二维构型分子结构的多样性，可以同时引入多种分子间作用力，实现不同分子间作用力的协同作用，增加载流子在分子间转移几率，从而有利于获得高的电学迁移率。基于此，设计合成了系列基于苯并噻吩的“H”构型二维稠环 π -共

轭化合物，利用气相法制备了微米带，XRD 及选区电子衍射均证实形成的微米棒具有单晶特性。基于单晶微米棒制备了场效应晶体管，显示了高达 $15.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的迁移率，开关比大于 10^6 。单晶结构解析及器件的各向异性研究表明，这种二维构型有利于实现 π - π 堆积相互作用和 S...S 相互作用的协同作用。各向异性的研究结果也证实了非共价键分子间作用力对于材料聚集态和电学性能的影响。

关键词：有机场效应晶体管，二维构型，迁移率

D05-P27

基于非富勒烯受体的有机光伏体系中材料的结晶性对开路电压的影响

陈志豪，郝晓涛

山东大学物理学院

非富勒烯材料是未来进一步提升有机太阳能电池效率的有效途径之一，也是当下有机光伏研究的重点方向。最近，已经有器件效率超过 14% 的报道。开路电压是决定有机光伏器件的重要参数，然而有机体系中较高的开路电压损失成为有机光伏进一步发展的一大障碍。本工作重点研究了非富勒烯受体有机太阳能电池中材料结晶性对开路电压的影响。选用的给体材料为 PBDB-T，是当下研究成熟的高效率给体；受体材料分别选取了非富勒烯受体 O-IDTBR，其在退火后表现出很强的结晶性；同时 PC71BM 也作为对照进行了使用。电池器件制作显示 PBDB-T 与 O-IDTBR 构成的体异质结在 AM1.5 的模拟太阳光源测试下效率为 7.6%。在不同温度退火处理后，开路电压有最大接近 10% 的降低，同时 AFM 测试显示随着退火温度的升高，薄膜中的出现不断增大的结晶区域。这样的结晶导致了体系 HOMO 和 LUMO 的能级分布出现变化，禁带中出现电子和空穴可占据的能级，进而导致了开路电压的降低。通过低温载流子迁移率测试，可以测得不同温度各个退火条件下 O-IDTBR 和 PC71BM 薄膜的能级高斯分布的标准差，通过比较可以发现非富勒烯受体 O-IDTBR 的值更小，但随着结晶程度的增强不断增大。略入射广角 X 射线衍射进一步解释了这样的现象来源于给受体分子之间在热处理前后堆积紧密程度的差异，进而导致共轭长度的变化。最后根据实验结果，给出了开路电压表达式的进一步修正，为非富勒烯有机太阳能电池在开路电压方面的未来研究提供了支持。

关键词：有机太阳能电池，非富勒烯材料，开路电压，结晶性

D05-P28

绝缘聚合物对有机太阳能电池活性层厚度的优化

王桐，毕鹏青，郝晓涛

山东大学

目前，体异质结聚合物太阳能电池以其柔性、成本低、可再生、轻量化等优点而受到人们的广泛关注。然而，对于大部分的体系，其最佳活性层厚度较薄 ($\approx 100 \text{ nm}$)，当利用卷对卷等技术制成大厚度活性层有机太阳能电池时，会导致其效率有明显的下降。

因此，该工作通过在二元体异质结聚合物太阳能电池活性层中加入具有绝缘性的第三元聚合物来优化其形貌，以达到提高填充因子以及大厚度活性层情况下的转化效率，所采用的二元体系为 PTB7:PC71BM，绝缘聚合物为聚丙烯。其中，利用了 GIWAXS 和 AFM 实验分别研究了分子取向和活性层的形貌，稳态和时间分辨荧光技术研究了整个三元体系的光物理过程，SCLC 方法计算了二元体系以及三元体系的电子和空穴的迁移率数值，通过制作倒置结构的器件，得出不同活性层厚度下的器件参数以及外量子效率的曲线。

分析实验结果，可以发现，聚丙烯的掺入，增加了 PTB7:PC71BM 的相分离程度，促进了给受体之间的电荷转移，增加了载流子的迁移率，最终导致器件参数中填充因子的增加，因此，空穴与电子的复合会有所减小，当制成大厚度活性层后，相对于二元体系来说，会提高其转化效率，减小整个体系对活性层厚度的敏感性。

关键词：有机太阳能电池，绝缘聚合物，活性层厚度

D05-P29

基于 N 型二维有机单晶的高性能有机场效应晶体管和近红外光电晶体管

王聪，任晓辰，张小涛，胡文平

天津大学

有机场效应晶体管和近红外光电晶体管因其在逻辑电路、夜视、健康检测和热成像分析等领域具有广泛应用而在过去几

十年来受到了全世界特别的关注。通常来说,敏感度是评价一个近红外晶体管性能优劣的重要指标。而当今研究的瓶颈是窄带隙近红外材料通常因为热激发在黑暗条件下也形成较高载流子密度从而暗电流高居不下。为了获得一个理想的敏感度,通常需要两点:一是提高晶体管的载流子迁移率;二是降低暗电流。超薄二维有机单晶恰好具备了以上两点优势:一是长程有序无晶界的单晶,有利于制备高电子迁移率的场效应晶体管;二是仅有几个分子层的超薄沟道,在阈值电压附近可以处于完全耗尽层从而使暗电流得以降低。

本文基于本组开发的“溶液外延”生长方法,成功制备了一种在 830 nm 近红外波段显示出很强的吸收峰的吩噻吩醌式样品(TFT-CN)的N型有机二维单晶。制备出的二维晶体最大尺寸可达毫米级别而厚度仅有 4.8 nm,对应 2~3 个分子层。经过粉末 X-射线衍射、大面积的偏光显微镜、选区电子衍射等表征,证明了毫米级别的 TFT-CN 晶体为一整块单晶并且无明显有晶界的存在。以 TFT-CN 二维有机单晶同时作为吸光层和导电沟道制备而成的有机近红外光电晶体管显示出了非常优异的性能。晶体管的场效应电子迁移率最高为 $1.36 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。平均为 $1.1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$,开关比可达 10^8 。与此同时,光电晶体管的响应度(R)和外量子效率(EQE)非常高,分别为 $9 \times 10^4 \text{ A W}^{-1}$ 和 $4 \times 10^6 \%$ 。更重要的是,晶体管在阈值电压附近操作时显示出了超过 $6 \times 10^{14} \text{ Jones}$ 的超高探测度(D^*)。这也说明了基于二维有机单晶的近红外光电晶体管同时具有巨大科学研究和潜在应用价值。

关键词:有机二维单晶, N 型, 场效应晶体管, 近红外光电晶体管

D05-P30

有机场效应晶体管的制备及其性能研究

蒋雅倩

中国科学院大学化学研究所

上世纪八十年代中期,以有机半导体作为活性层的有机场效应晶体管(OFET)首次进入世人的视线。经过数十年的研究工作以后,其在柔性电路、电子纸、电子标签、传感器和柔性显示器件的驱动电路等领域,存在着无法估量的潜在价值和应用前景。然而制备出高性能的有机场效应晶体管一直是人们研究的重点和难点,其涉及到多个界面的优化、源漏电极和栅极的选择、以及器件结构的合理选择等多方面的因素。本论文拟围绕着有机聚合物半导体材料,利用溶液法加工技术,从电极/有机半导体界面优化出发,制备出高性能的聚合物场效应晶体管器件,并对其性能进行研究。

D05-P31

石墨烯基材料力/电性能影响因素研究

陈泓武, 吴明懋, 石高全, 李春

清华大学化学系

对石墨烯基薄膜材料的力/电性能的改善一直是研究的重点。人们普遍认为用更大的 GO 片层组制备的薄膜会具有更好的力学性能,化学还原后亦具有更好的导电性能,而没有对 GO 本征化学结构的影响给予足够的重视。本论文试图阐明,化学结构更显著地影响纯 GO 薄膜的断裂强度及模量以及 rGO 薄膜的导电性。我们通过调控合成 GO 的过程以及所用石墨粉的尺寸,实现了对尺寸分布与化学结构近似独立的控制,在控制成膜方式,湿度等变量的前提下,发现相比于大片层、高氧化程度的 GO,由小片层、低氧化程度的 GO 制备的薄膜在断裂强度上要比前者高近 55%,还原后得到的 rGO 薄膜导电性亦有 120%的提升。同时,我们结合 GO 样品的片层尺寸与化学的表征结果,从理论的角度给出了化学结构影响薄膜力/电学性能的机制。

关键词:石墨烯基薄膜材料,氧化石墨烯,力学性能,导电性,化学结构,尺寸分布

D05-P32

通过引入绝缘聚合物架构提高大厚度有机光伏器件的稳定性和性能

温振川, 郝晓涛

山东大学

由于化石燃料的不可再生性,以及其大量长期的使用,引起全球范围的环境污染,新的可再生能源是未来发展的必需品。太阳能,作为一种新型清洁能源,如果对其进行有效的利用,吸引了全球大量科研工作者以及研究单位的注意。有机太阳能电池由于其高度的柔性、重量轻以及能够用于大面积制备,成为了一种被寄予厚望的能源获取方式。对于有机太阳能电池,由于其活性层厚度(约 100 nm)的限制,对太阳能的获取并不理想,而如何在不影响太阳能电池性能的前提下,提高其对

太阳能的获取，是一个极具挑战的问题，因此，引入第三元到本体异质结构中，来解决这个问题。

在本文中，选用 PBDB-T: ITIC 这个体系作为本征器件，将绝缘聚合物 PMMA 作为第三元掺入到本体异质结构中，优化以后的大厚度器件 PCE 能够保持本征器件的 90%。PMMA 作为一种可以自组装的柱状纳米结构，在其富集区域，能够形成贯通活性层的柱状结构，有利于增加器件的迁移率从而抑制电荷重组。虽然 PMMA 作为一种绝缘非光敏材料，但是掺入 PMMA 以后，活性层对光的获取并没有发生明显的减少。与此同时，PMMA 的掺入能够增加活性层的厚度，提高器件的稳定性并且能够提高对可见光区域光的获取。本文的研究结果揭示了绝缘材料可以作为一种辅助的添加剂添加进有机太阳能电池中，来提高其性能。

D05-P33

单线态裂分的机理探索

夏建龙，胡嘉华，许珂

武汉理工大学

单线态激子裂分，通常简称为单线态裂分 (Singlet Fission, SF)，是指当有机半导体材料吸收一个光子产生单线态激子后，通过一个自旋允许的裂分过程形成两个三线态激子的多激子产生现象。具有 SF 的材料吸收一个光子后可以产生两个三线态激子。研究表明，将能产生 SF 的半导体材料用于异质结太阳能电池，可以突破光电转换的 SQ 定律限制，理论上 PCE 最高可达 44%。迄今为止，SF 的具体机理尚不清楚，其中一个被大部分研究人员所接受的机理是：有机半导体材料受光照激发后形成的单线态，通过形成一个紧密相关的三线态对 (triplet pair, 1(TT)) 中间态，然后再裂分成两个独立的三线态 ($2\times T1$)，如图 1 所示。根据该裂分机理，产生 SF 的前提条件是：单线态的能量大于或等于三线态对中间体的能量，即 $E(S1)\geq E1(TT)$ 。目前对于产生 SF 的内在机制理解还不够深入，限制了单线态裂分在太阳能电池中应用的进一步研究。本次汇报将主要介绍我们实验在单线态裂分机理研究方面所取得的最新进展。

D05-P34

晶态有机半导体能带工程

王海波

吉林大学材料科学与工程学院

近几年，通过科研人员的努力有机半导体的迁移率已经获得了大幅提升。随着迁移率的提升，有机半导体表现出了能带或者类能带的传输特性。通过低温实验和光电子能谱已经证实了有机单晶中能带的存在。另外，有机半导体中能带弯曲和空间电荷区的观察也进一步说明了有机半导体的能带特征。有机半导体的能带传输在理论上为其能带工程提供了可能，为制备新原理和新构型的有机电子器件提供了机会。有机弱外延方法能够制备高质量结晶性有机薄膜，并且表现出高迁移率和低缺陷的特点，该制备技术为有机半导体能带工程的实现提供了保障和支持，解决了有机半导体能带工程在技术实现上的问题。

这里，我们采用三角形势阱和方形势阱两种器件结构，通过对能级的匹配，构建并利用有机 2DEG 作为传输沟道，制备高电子迁移率的有机晶体管 (HEMT)，实现高效的电子传输。我们以酞菁氧钒 (VOPc) 作为窄带隙半导体，以棒状分子六联苯作为宽带隙半导体，构建有机 2DEG 结构，最高电子迁移率达到了 $10\text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。

关键词：有机半导体，二维电子气，有机晶体管，电子传输，能带工程

D05-P35

Regulating the vertical phase distribution by fullerene-derivative in high performance ternary organic solar cells

毕鹏青，郝晓涛

山东大学

The vertical phase distribution of components in bulk heterojunction is diversified in OSCs. The electron donors can be accumulated at the interface of active layer and charge extraction layer. The variation of vertical phase distribution significantly influences device performance because of its impact on the charge transport and charge recombination. In order to achieve favorable vertical phase distribution in OSCs based on PBDB-T: ITIC, PC71BM was incorporated into the binary system to fabricate ternary OSCs. In the ternary blend, PC71BM can effectively regulate the phase distribution of PBDB-T and ITIC in vertical direction, which provides favorable vertical phase distribution for charge transport. Moreover, the addition of PC71BM can also effectively increase the π - π stacking coherence length of both donor and acceptor, which facilitates charge transport and reduces the bimolecular

recombination. The addition of an appropriate quantity of PC71BM can obviously improve both fill factor and short-circuit current density of the OSC based on PBDB-T:ITIC.

Key words: vertical phase distribution, non-fullerene acceptor, ternary organic solar cells, charge transport

D05-P36

有机微纳单晶材料的图案化组装及其在高性能光电子器件中的应用

揭建胜

苏州大学

有机小分子半导体微纳单晶材料具有许多独特的性质：如机械柔性，多功能性和光、电性质的可调性，可以与无机半导体纳米晶材料形成互补甚至竞争。因此，有机微纳单晶材料被认为是构建新一代低成本、柔性，可拉伸和可穿戴光电子器件的最佳选择之一。然而，由于有机微纳单晶其生长方向和生长位置本质上的随机性，导致其大规模应用具有很大的挑战。为了满足大规模器件应用，有机微纳单晶必须首先能在特定区域沉积以实现图案化和阵列化结构。

在本报告中，我们将重点介绍在大面积阵列化和图案化组装有机微纳单晶方面的进展。我们发展了一系列界面诱导自组装方法在固-液、液-液和汽-固界面上制备了阵列化的一维有机小分子微纳米线。同时，我们将会介绍利用毛细管辅助电场法来组装大面积图案化的一维和零维有机晶体。在这个方法中，我们可以通过调控模板的几何图形，来获得各种图案化结构的有机微纳晶体。最后，将介绍光刻辅助涂布技术——旋涂，滴涂和刮涂实现在特定区域高精度、高效率地生长有机单晶微纳米线阵列的方法。利用该方法，我们可以很容易地制备大面积高精度的有机单晶纳米线阵列，并可以拓展到柔性衬底上。我们的工作为未来高性能，低成本有机光电器件的发展奠定了材料基础。

D05-P37

熔融法加工聚合物半导体材料

赵岩¹，刘云圻^{2,1}

1.复旦大学材料科学系

2.中国科学院化学研究所

聚合物半导体材料因其独特的光电性能，以及柔性、易于低成本加工等优势，在有机光电功能器件领域有着极为广泛的应用。如何通过合适的加工工艺，低成本加工高性能的聚合物电子器件，是聚合物半导体领域的重要研究内容，也是其从基础研究走向实际应用的必经途径。溶液法加工是聚合物半导体的重要加工方法，通过旋涂、喷墨打印等方法，我们制备了高性能的聚合物场效应晶体管及电路。但溶液法加工过程中大量使用含氯的有机溶剂，不仅增加了制备成本，也带来了许多环保方面的担忧。通过对材料的分子设计与体系优化，我们获得了可熔融法加工的聚合物半导体，避免了含氯有机溶剂的使用。我们还探讨了分子结构对聚合物机械性能的影响，扩展了其在柔性电子中的应用。

关键词：聚合物

D05-P38

高性能红光高分子热激活延迟荧光材料的电致发光性能研究

谢国华¹，薛钦²，程延祥³

1.武汉大学

2.华中师范大学

3.中国科学院长春应用化学研究所

热激活延迟荧光（TADF）材料是继第一代传统荧光材料和第二代磷光材料之后被认为用于有机电致发光器件（OLED）最有前景的第三代材料。为了满足实用和低成本量产需求，我们开发了一系列新型的 TADF 高分子材料。通过调控高分子中的骨架和红光 TADF 单元的比例，我们可以方便地调节材料的光物理特性，从而控制器件的电致发光光谱的峰值、谱型和色纯度。通过器件制备和优化后，我们实现了外量子效率高达 19.4% 的红光高分子 OLED，该指标高于目前已报到的同类材料的最优值，也验证了我们采用骨架单元作为给体、侧链作为受体策略的优越性。这一研究结果为开发溶液加工的新型有机电致发光材料和器件提供了重要的思路。

关键词：高分子，热激活延迟荧光，有机电致发光器件

D05-P39

自修复导电弹性体的制备及其在力学传感中应用研究

韩阳阳, 张新星, 卢灿辉

四川大学高分子研究所

发展可拉伸柔性导电高分子材料在柔性电子器件的发展中具有重要作用。制备一种可有效修复力学/电学损失的高性能导电弹性体可有效延长材料寿命, 具有重要研究意义。本文基于超分子键(金属-配体, 硼酸酯键)交联构建自修复弹性体, 通过对导电微纳米结构(三维隔离导电, 螺旋导电层)的设计, 制备了力学传感器, 并探索了其在可穿戴设备中应用。实验结果表明, 制备的超分子导电弹性体具有较高的力学强度和可拉伸性, 可以不需要外加刺激实现室温自修复。同时, 具有独特导电结构赋予弹性体能够实现导电性能的快速修复, 对应变有高灵敏度, 可检测微小应变 (<1%), 在可穿戴设备中具有广泛应用。

关键词: 自修复, 应变传感

D05-P40

控制石墨烯的生长波动

武斌, 郭巍, 刘云圻

中国科学院化学研究所

可控制备石墨烯是一个重要的科学问题。然而, 化学气相沉积制备石墨烯普遍存在较大的波动性。本工作以铜基底上生长单晶石墨烯为模型体系, 研究了导致生长过程中波动性的主要因素, 结果表明, 体系中微量水氧含量的不确定性是生长波动的主要内在因素之一。通过控制水氧的含量, 石墨烯的成核密度、生长速度、成核时间、大小等性质可以得到控制。最高生长单晶石墨烯的速度可达 190 微米/分。厘米级尺寸的单晶石墨烯可重复制备。在生长机制方面, 少量水氧条件下导致石墨烯较小的成核密度和较快的生长速度, 而过量的水氧含量造成较大的成核密度和较慢的生长速度。这一工作揭示了控制水氧含量在石墨烯生长中的重要基础作用, 对其它二维材料的生长具有借鉴作用, 具有普遍的意义。

D05-P41

基于萘的有机光电功能分子的设计、合成及性能研究

辛涵申, 高希珂

中国科学院上海有机化学研究所

萘(Azulene)是一种青蓝色的具有较大分子偶极矩的非苯芳香化合物。近些年, 萘在构筑有机光电材料方面取得了一些进展。然而设计、合成新型的基于萘的有机光电功能分子仍面临着很多困难和挑战。基于此, 我们课题组设计并合成了一种新型有机半导体材料结构砌块——联萘二酰亚胺(BAzDI), 其分子结构包含两个萘环和两个酰亚胺单元。研究表明, BAzDI具有特殊的分子结构和物理化学性质, 有望成为一类重要的有机半导体材料结构砌块。最近, 我们在BAzDI的6,6'-位引入不同给/吸电子和共轭长度的取代基, 合成了五个BAzDI衍生物。研究表明这一系列BAzDI衍生物都具有较好的场效应晶体管性能, 其电子迁移率最高可达 $0.52 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。

另一方面, 将2,6-位连接的萘单元引入共轭聚合物主链, 可以充分利用萘的分子偶极(D-A结构), 获得强的分子间作用力, 进而获得高的光电性能。因此, 设计合成基于2,6-位萘单元的共轭聚合物具有重要的研究意义。我们选择在联萘二酰亚胺(BAzDI)的6,6'-位进行 π 扩展, 首次报道了两例基于萘2,6-位连接的共轭聚合物P(TBAzDI-TPD)和P(TBAzDITFB), 并将其应用于有机场效应晶体管(OFET)和全聚合物太阳能电池(all-PSC)研究。基于P(TBAzDI-TPD)的OFET器件表现出了高达 $0.42 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的电子迁移率, 这是基于n-型聚合物的底栅极OFET器件的最高性能之一。此外, 由P(TBAzDI-TPD)为受体材料、PTB7-Th为给体材料构筑的all-PSC器件表现出1.82%的光电转换效率, 表明该类聚合物在all-PSC器件中同样具有较大的潜力。

关键词: 萘, 联萘二酰亚胺, 共轭聚合物, 有机场效应晶体管, 有机太阳能电池

D05-P42

酞菁钴准一维纳米结构的制备及其生长过程的探究

姚一, 王凯, 陈昊, 董纳, 徐法强

中国科技大学 国家同步辐射实验室

酞菁钴是具有大 p 共轭环的有机小分子, 作为有机半导体材料在制作光电功能器件方面有独特优势, 因此在有机场效应管和气体传感器等方面得到广泛应用。本工作采用低真空下的石英管式炉和超高真空下的有机分子束外延系统, 通过时间控制的方法研究了不同温度下在原子级平滑的硅片表面气相沉积生长酞菁钴一维纳米线的动力学过程, 并用 SEM, XRD 和拉曼光谱等方法表征了酞菁钴纳米线从分子着陆衬底到成核直至生长出纳米线的过程。

经 SEM 表征发现, 在约 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 和 $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时纳米线的成核方式有较大区别, 在 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时酞菁钴在衬底表面生长一层薄膜, 此薄膜并不完全覆盖衬底, 而是树枝状交错在衬底上, 纳米线大多从交叉的界面部分延伸生长, 而在 $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时酞菁钴在衬底表面直接生长并列的高取向纳米线薄膜微区, 大规模的纳米线生长始于微区的顶端部分。XRD 结果显示, 随着生长时间的延长, 无论 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 还是 $200\text{ }^{\circ}\text{C}$, 酞菁钴晶体的结晶性均呈现逐渐变好的趋势。拉曼表征结果显示, 随着纳米结构的生长由 C-N-C 构成的 16 个原子大共轭环伸缩振动所产生的特征峰向高波数移动, 此现象的产生归因于力常数的变大。准一维纳米结构在生长的过程中比表面积迅速增大, 晶体表面的残余应力表现出越来越重要的作用。

研究过程中还发现, 酞菁钴在一定条件下形成准一维的纳米带结构, 并且具有边缘优势生长的趋势。导致边缘生长现象的原因为纳米带两侧的表面残余应力导致生长端点的结合能较高, 此现象与拉曼光谱特征峰因表面残余应力导致的向高波数移动现象相互印证。

关键词: 酞菁钴, 准一维纳米结构, 成核

D05-P43

基于二氟取代苯的高迁移率共轭聚合物

王明¹, 黄峻^{1,2}

1. 东华大学先进低维材料中心

2. 东华大学纤维材料改性国家重点实验室

近年来, 窄带隙 D-A 型共轭聚合物在场效应晶体管应用中取得了重大进展, 迁移率可达到 $10\text{ cm}^2/\text{Vs}$ 左右。这些高迁移率 D-A 聚合物给体通常采用二噻吩并环戊二烯, 噻吩及其衍生物等结构, 受体通常采用苯并噻二座, DPP, IDG 以及基于这些基元衍生出来的结构。过去, D-A 型共轭聚合物取得高迁移率通常被归结于相邻分子间的 D 结构基元与 A 结构基元存在偶极偶极相互作用, 可以促进分子间形成 DA 交错堆积的有序结构。但是最近也有一些研究表明, 在一些代表性的高迁移率 D-A 聚合物固体中, 并没有形成这种 DA 交错堆积的有序结构, 而是倾向于形成 DD 和 AA 堆积的有序结构。这些研究表明, 分子间的偶极相互作用是否能主导分子间的有序堆积并没有明显结论。因此, 在设计高迁移率分子时, 并不一定需要采用具有较强 D-A 效应的结构。

作者据此设计合成了基于二噻吩并环戊二烯为电子给体, 二氟取代苯为电子受体的具有弱 D-A 效应的聚合物, 分别是 PhF2,3, PhF2,5 和 PhF2,6。这些新型聚合物与常见的以苯并噻二唑, 氟代苯并噻二唑, 吡啶噻二唑等结构为强电子受体的 D-A 型聚合物相比, 结构非常相似, 但二氟取代苯的拉电子能力非常弱, 因此, PhF2,3, PhF2,5 和 PhF2,6 的光学带隙较宽, LUMO 能级位置较高, 因此具有典型的纯 p 型载流子传输特性, 同时这些材料在相同条件下制备的场效应晶体管器件迁移率相当。作者用掠入射 X 射线衍射实验测试了这些聚合物薄膜的堆积特性, 发现这些聚合物的薄膜堆积特性很类似。这些结果表明, 聚合物获得高迁移率并不需要较强的拉电子结构基元。在器件稳定性测试中, PhF2,3, PhF2,5 和 PhF2,6 在多次器件开关过程中电流电压曲线均有较好的重现性, 体现出非常好的器件稳定性。

在进一步的器件测试中, 作者发现在使用带纳米沟槽的基板上, 直线型聚合物 PhF2,5 和 PhF2,6 具有较好的各向异性自组装特性, 而弯曲型的聚合物 PhF2,3 各向异性自组装特性不明显, 这分别在场效应晶体管器件性能和掠入射 X 射线衍射实验中得到验证。其中直线型的分子排列取向更有利于载流子沿聚合物主链传输, 迁移率更高, PhF2,6 器件的最好的迁移率达到了 $5.7\text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。因此, 作者提出直线型的分子更有利于在纳米沟槽上的自组装。

综上所述, 基于二氟取代苯的弱电子受体聚合物是一类性能优异的高迁移率半导体。

关键词: 二氟取代苯, 场效应晶体管, 高迁移率, 共轭聚合物, D-A 聚合物

D05-P44

基于双吡咯并吡咯二酮聚合物的高性能双极性有机场效应晶体管

杨杰^{1,2}, 王帅², 郭云龙¹, 刘云圻¹

1. 中国科学院化学研究所

2. 华中科技大学

有机场效应晶体管 (OFETs) 具有质量轻、可弯曲和可大面积溶液加工等特点, 在柔性器件和可穿戴电子学中具有广阔的应用前景。高性能有机半导体材料是 OFET 的核心组成部分, 是 OFET 应用的基础。其中, 双极性材料在制备简单、低成本的互补金属氧化物半导体(CMOS)电路有重要应用价值。然而, 目前文献报道的大部分高性能有机半导体材料是 p 型材料。

针对高性能双极性有机半导体缺乏的现状, 基于经典的吡咯并吡咯二酮 (DPP) 受体, 采用受体二聚策略, 本文设计合成了双吡咯并吡咯二酮 (2DPP) 新型聚合物。2DPP 类聚合物 LUMO 能级比 DPP 类聚合物的降低了 0.1 eV, 显著降低了电子的注入势垒, 从而使得 2DPP 类聚合物电子迁移率最大提升了 180 倍, 空穴迁移率也得到了一定程度的提高。为充分发挥有机半导体材料的柔性优势, OFET 器件采用塑料基底。基于 P2DPP-TT 构筑的柔性晶体管空穴和电子迁移率分别高达 4.16 和 $3.01 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 基于 P2DPP-BT 的柔性反相器增益高达 70, 证明 2DPP 类材料可以应用于有机电路中。合成的 4 个 2DPP 类聚合物, 均表现出优异的双极性传输特性, 其中三个表现出平衡的双极性, 证明 2DPP 单体是一类优异的双极性材料构筑单元。

D05-P45

有机光电材料中三重激发态的产生和利用

吴义室¹, 姚建年¹, 付红兵^{1,2}

1.中科院化学所

2.天津大学

有机光电材料以其工艺简单、成本低廉、可制备大规模柔性器件等优点在有机发光二极管、有机太阳能电池和有机场效应晶体管等领域表现出巨大的应用价值。其中材料中三重激发态的产生对其功能的实现起到了至关重要的作用。我们利用不同的三重态产生机理来高效获得三重激发态, 并探索了三重态材料可能的应用: 1) 发展了一类反芳香性分子体系, 可通过分子内激子裂分过程获得多重激子态, 多重激子态在薄膜中可进一步发生激子迁移转化为两个独立的三重激发态, 三重态产率达到 142%; 2) 发展一类基于茚酰亚胺 PDI 和并五苯 Pc 的异二聚体材料体系, 利用溶剂极性的变化调控 PDI 和 Pc 之间的电荷转移作用强度, 可发生高效的系间窜越过程得到三重态; 3) 设计合成了一类有机硼化合物, 利用其高效的三重态磷光产生实现了有机微纳晶材料的磷光激光输出, 这是有机磷光激光的首次报道; 4) 研究了一类吩嗪化合物中的光物理过程, 通过能级调控, 可分别实现源于三重态的延迟荧光和磷光发射。

关键词: 有机光电材料, 三重激发态, 系间窜越, 激子裂分

D05-P46

在聚合物表面自上而下生长的 n 型单分子层分子晶体应用于高迁移率晶体管和栅控横向 p-n 结

石燕君¹, 江浪^{1,2}, 胡文平³, 朱道本¹, Henning Sirringhaus²

1.中国科学院化学研究所

2.剑桥大学卡文迪许实验室

3.天津大学理学院

在绝缘层上自组装功能材料的单分子层是发展分子器件的一种很有前途的方法。自组装单分子层 (SAM) 可以通过与基底化学键合、Langmuir-Blodgett 或者生长自由站立的单分子层分子晶体等方法获得。然而, 与基底化学键合的半导体共轭分子的 SAMs 一般表现出低于 $0.05 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的迁移率。自组装的单分子层分子晶体难以长大并且局限于在带羟基终端的基底上生长, 但羟基终端表面会严重捕获电子, 导致难以实现 n 型电荷传输的器件, 因此阻碍了复杂器件功能的实现。这里我们介绍了一种重力辅助二维空间限域的方法来实现自下而上生长的高质量 n 型单分子层分子晶体。结果表明, 该方法可以有效的在无羟基的聚合物表面制备厘米级别的 n 型单分子层分子晶体, 其晶体管器件具有高达 $1.24 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的迁移率, 表现出能带传输特性。基于该单分子层分子晶体, 我们首次实现了高性能单晶的栅控和光控横向有机 p-n 结。

D05-P47

低维有机晶体的可控制备和光电性能研究

杨贺, 武斌, 刘云圻

中国科学院化学研究所

有机小分子或聚合物是一类重要的光电材料, 种类丰富、柔性良好, 在分子开关、光伏器件、场效应晶体管、光电晶体管等方面有着广阔的应用前景。高质量有机晶体的制备是对其所所有性能研究和应用探索的根本和前提, 其中, 用化学/物理

气相沉积法制备得到的低维有机晶体材料更是表现出优异的性能。以具有良好光电性能和高载流子迁移率的有机小分子半导体材料红荧烯为例，研究了反应参数——降温速率和生长时间对红荧烯形貌的影响，提出其生长过程可以由熔融结晶机制来描述。优化生长条件可控的制备出了高质量、大尺寸的正交晶系红荧烯单晶。对所制备红荧烯单晶的电输运性质进行研究，得到室温下红荧烯的场效应迁移率接近 $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ，开关比高达 10^6 。并发现所制备晶体中同质结的存在降低了其场效应迁移率。

关键词：低维有机晶体，气相沉积法，熔融结晶机制，晶体同质结，光电性能

仅发表论文

D05-PO-01

基于有机半导体材料的光电传感器器件

郭云龙

中国科学院化学研究所

人视网膜中视锥细胞光感受器吸收并区分不同波段的光子，从而感知多彩的画面；因此模仿人视网膜功能、构筑出具有颜色区别功能的智能化光传感器对人工智能和仿生电子学尤为重要。采用吸收峰在不同波段的有机共轭材料，材料学家已实现了可见波段分别对红、绿、蓝敏感的光传感器。然而考虑到人眼在近红外区的低敏感度和近红外光在夜间安防、医学成像和仿生视觉系统中的巨大价值，制备出对近红外高选择性、抗可见干扰的光传感器至关重要。

当下的有机近红外光探测器受制于大部分窄带隙材料在可见光区（380-760 纳米）的强吸收和近红外区较低的光电转换效率，对近红外的选择性低于可见区，因此需要滤光片排除可见光的干扰。该措施会增加器件厚度，降低可穿戴性，限制了超薄膜、类视网膜型近红外光传感器的发展。我们采用四种有机染料衍生物半导体材料，成功地构筑了一款免滤光片、高度选择性地将近红外光转换为非挥发导电记忆行为的超薄光传感器。该器件可在 62 分贝的动态范围内将 850 纳米近红外光转换为非挥发记忆电导信号，在 86 分贝动态范围内将 550 纳米绿光转换为动态光开关信。该体系实现了对近红外光信号的选择性记忆，类似视网膜的波段选择性。

关键词：有机半导体材料，晶体管，光电传感器器件

D05-PO-02

蛋白 A 功能化金磁微粒探针的制备及在电化学发光免疫传感器检测毒素中的应用

穆晞惠，刘冰，杜斌，刘志伟，汪将

国民核生化灾害防护国家重点实验室

基于金磁微粒兼有纳米金颗粒与磁微粒特性的优势，将蛋白 A (SPA) 定向固定抗体、金磁微粒提高功能化探针活性与高灵敏电化学发光 (ECL) 技术相结合，以蛋白 A 包被金磁微粒偶联毒素多克隆抗体制备的蛋白 A 功能化金磁微粒探针作为磁性捕获探针，三联吡啶标记毒素单克隆抗体作为电化学发光探针，建立了一种基于蛋白 A 功能化金磁微粒探针的电化学发光免疫传感器检测毒素的方法，实现了微量蓖麻毒素 (ricin) 的检测。该方法的检测线性范围为 0.002~500 ng/mL，ricin 浓度的对数值 ($X = \text{LgCricin, ng/mL}$) 与其 ECL 强度值 ($Y, \text{a.u.}$) 之间呈显著直线相关，回归方程为 $Y = 171.42X + 398.51$ ($R = 0.9905, N = 12, P < 0.0001$)，检测限为 0.002 ng/mL。该方法比传统基于磁微粒功能化探针的电化学发光免疫传感器检测灵敏度提高 9 倍，表明蛋白 A 功能化金磁微粒探针具有信号放大效应，且金磁微粒和蛋白 A 在电化学发光免疫传感器中显示出不同的放大效应，其单独放大效应可使检测灵敏度分别提高 3 倍和 3 倍；另外，该方法比传统双抗体夹心酶联免疫吸附分析法 (ELISA) 检测灵敏度提高 125 倍。该方法将蛋白 A 功能化金磁微粒探针与 ECL 技术的优势相结合，提高了检测灵敏度、特异性和抗干扰能力，适用于水样、土样、食品及血液等各种模拟样品中微量 ricin 样品分析，具有较好回收率与重现性，回收率为 90.8%~94.2%，相对标准差为 1.53%~3.18%。

关键词：蛋白 A；金磁微粒，功能化探针，电化学发光免疫传感器，毒素

D05-PO-03

导电聚合物水分散体的制备及其柔性薄膜电学性能

张文娜，章文文，牛俊龙，朱帅，陈帅

江西科技师范大学

导电聚合物材料是目前功能高分子领域研究的一个热点。聚(3,4-乙撑二氧噻吩)(PEDOT)及其水分散体(PEDOT/PSS, 商标如 CHVIOS P)是目前研究最深入和商业化程度最高的导电聚合物材料之一, 已经成功应用与抗静电、有机太阳能电池、超级电容器、电致变色等领域, 其应用性能在不断提升, 应用空间在不断拓展。但 PEDOT/PSS 存在单一的分子结构、成本高等缺陷, 一定程度上限制了其未来发展。

本研究采用酸催化醚化的路线, 以 3,4-二溴噻吩为起始原料, 成功合成了 3,4-二甲氧基噻吩、3,4-乙撑二氧噻吩(EDOT)及其: 硫、氮、硒衍生物及它们的衍生物(EDOTs)如 3,4-丙撑二甲氧基噻吩(PEOT)、3,4-乙撑二硫噻吩 (EDTT)、3,4-丙撑二硫噻吩 (PDTT)、3,4-乙撑二氧硒吩 (EDOS)、3,4-丙撑二氧硒吩 (PDOS) 等, 优化了常规的反应路线, 获得了 40%~90% 的产率。采用化学氧化聚合的方法, 以聚对苯乙烯磺酸 (PSS) 水溶液、杂环化合物单体 (吡咯、硒吩、3-甲基噻吩、3-甲氧基噻吩、EDOTs)、氧化剂 (FeCl_3 、 $\text{H}_2\text{O}_2/\text{Fe}^{2+}$ 、 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8$ 和 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_8/\text{Fe}^{3+}$) 为反应体系, 采用惰性气氛下恒温机械搅拌的方式反应, 成功实现了杂环化合物单体的化学氧化聚合和聚合物分散的同步进行, 粗产物采用阴阳离子交换树脂处理, 后旋蒸至合适的固含量, 并经均质处理获得固相平均粒度在 100 nm 左右的不同颜色的透明澄清或深色水分散体系。将聚合物水分散体在聚丙烯塑料基板上涂覆, 真空干燥得到可裁剪的自支撑柔性导电薄膜。采用四电极法, 298 K 时, 薄膜电导率在 10⁻⁶~10⁻² S/cm, 并与温度呈正相关。通过二甲基亚砜(DMSO)、乙二醇、异丙醇等溶剂处理后, 薄膜的柔韧性和平整性得到改善, 除个别样品如 PEDTT/PSS 外, 多数样品薄膜的电导率提升 1-2 个数量级。相对于 PEDOT/PSS, 聚吡咯等多数水分散体样品透明性较好, 颜色较浅、分散稳定性更高。

总之, PEDOT/PSS 水分散体及其薄膜的综合性能仍是其它材料无法比拟和替代的, 聚合体系和导电促进剂如 DMSO 等二次处理对材料的影响及其机制也需进一步探究, PSS 酸性体系也存在固有缺陷, 在实际应用中有诸多限制。本研究将导电聚合物水分散体的相关研究和应用开发提供经验借鉴, 以此为基础, 相信易加工导电聚合物的研究将进一步加快。

关键词: 杂环化合物, 导电聚合物, 水分散体, 化学氧化聚合, 柔性薄膜

D05-PO-04

分子印迹修饰丝网印刷电极检测 T-2 毒素

杜斌, 童朝阳, 穆晞惠, 刘冰, 汪将, 刘帅

国民核生化灾害防护国家重点实验室

分子印迹聚合物 (Molecularly imprinted polymers, MIPs) 因其内部存在有与模板分子大小、形状、空间构型都互补的孔穴, 可对特定目标分子 (模板分子) 及其结构类似物特异性识别和选择性吸附, 具有灵敏度高、结构稳定、易于制备、可重复使用等诸多优点。丝网印刷电极将工作电极、参比电极、对电极集成为一体, 具有微型化、制作简单、可批量生产、成本低和样品用量少等优点, 在样品快速检测领域中有良好应用前景。本文将 MIPs、丝网印刷电极与电化学传感优势相结合, 采用电聚合方法在丝网印刷电极表面成功制备出可快速识别 T-2 毒素的分子印迹膜, 同时建立了基于分子印迹修饰丝网印刷电极的电化学传感器检测 T-2 毒素的新方法。该方法中聚合液以邻苯二胺为单体, T-2 毒素为模板, 采用循环伏安法扫描 20 圈, 用乙醇-乙酸混合溶液洗脱 1h, 即制得 T-2 毒素 MIP 修饰的丝网印刷电极, 采用循环伏安法对其进行电化学表征, 差分脉冲伏安法快速检测 T-2 毒素。实验结果表明, 当 T-2 毒素浓度在 0.5~500 $\mu\text{g/L}$ 内时, 差分脉冲伏安法的电流强度 (I) 与 T-2 毒素的自然对数浓度 ($\text{Ln}C$) 之间存在良好的线性关系: $I = 0.6881 \text{ Ln}C - 7.4857$ ($R=0.9955$, $N=6$)。

关键词: 分子印迹, 丝网印刷电极, 电化学传感器, T-2 毒素

D05-PO-05

拱形分子的设计与 OFET 性能研究

齐婷, 慕文静

中国科学院大学

结构异构体对杂并环类分子的光电性质会产生极大的影响, 而其中分子形状的影响越来越引起研究者的注意[1]。所研究的分子形状主要可以分为线形和角形分子, 而角形分子又可以细分为“S”形和拱形分子。目前, 绝大多数的结构异构体有关结构与性能关系的研究常集中于线形和“S”形异构体的比较, 且线形异构体分子通常表现出更好的器件性能。拱形分子的相关研究相对较少且不系统。因此, 我们设计、合成并表征了一系列烷基及苯基取代的线形和拱形二苯并噻吩并吡咯 (Dibenzothienopyrrole, DBTP) 异构体分子, 分别为线形正己基取代的 1-HDBTP 和苯基取代的 1-PDBTP, 以及拱形正己基取代的 a-HDBTP 和苯基取代的 a-PDBTP。单晶结构、光物理性质和 OFET 器件分析结果表明: 拱形的 DBTP 衍生物能通过取代基的改变更好地调控它们的电子结构和分子排列, 从而获得相对于线形 DBTP 衍生物更加优异的电荷传输能力。最终,

拱形苯基取代的 a-PDBTP 表现出了最优的分子 π 堆积方式和电荷传输能力, 其单晶器件迁移率为 $0.75 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 薄膜器件迁移率为 $0.058 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。此外, 为了提高化合物的溶解度, 我们在 a-PDBTP 的苯基取代基上引入己基 (C6)、辛基 (C8) 和癸基 (C10) 烷基链, 成功合成了 C6-a-PDBTP、C8-a-PDBTP 和 C10-a-PDBTP。实验结果表明, 不同长度烷基链的引入使化合物的溶解性增强, 从而能采用便捷的溶液法制备 OFET 器件。虽然三种化合物的光物理性质没有显示很大的区别, 但烷基链长度的不同使得器件性能带来了变化。最佳器件性能是在 $60 \text{ }^\circ\text{C}$ 退火条件下, 随着烷基链的增长, 器件性能有所增加。C10-a-PDBTP 的薄膜器件最高迁移率为 $0.02 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。这些结果表明拱形的 DBTP 骨架结构是一类非常有前景的可构筑有机半导体材料的结构单元。

关键词: 杂并环, 拱形, 有机场效应晶体管, 光电性质, 二苯并噻吩并吡咯

D05-PO-06

熔融玻璃表面制备二维过渡金属硫族化合物晶体

陈建毅

中国科学院化学研究所

二维过渡金属硫族化合物, 由于具有独特的结构, 优异的物理化学性质, 可以被应用于电子学, 光电子学, 储能, 超导, 传感等多种领域。目前, 有多种方法可以制备这类二维纳米材料, 例如, 机械剥离法, 物理气相沉积法, 金属硫化法, 化学气相沉积法等。机械剥离法制备的二维纳米材料, 其侧面尺寸一般只有十几个微米, 主要用于实验室基本物理性能研究。化学气相沉积方法由于可以制备规则的单层晶体, 是目前最为常用的方法。采用的生长基底一般是昂贵的硅片, 蓝宝石和金箔等, 其侧面尺寸可以达到几百微米。这里, 我们报了一种液相的化学气相沉积方法。采用熔融的玻璃作为生长基底, 我们制备了毫米尺度的三角形的二硒化钼晶体, 其最大尺寸可以达到 2.5 毫米。我们将其组装成场效应晶体管, 器件迁移率可以达到 $95 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 表明这种晶体具有很高的晶体质量。这种方法也可以用于制备毫米尺度的二硫化钼, 二硒化钨和二硫化钨晶体, 表明这种方法具有普适性。另外, 采用毫米尺度的二硫化钼晶体作为生长基底, 我们也研究了二氧化钼的同质外延生长行为。发现在高温下, 第二层二硫化钼晶体的形貌受控于生长体系中硫 (S) 的化学势。在适宜的化学势下, 我们可以制备出规则的分型的二硫化钼晶体。双层的二硫化钼主要采用 3R 堆积模式。不同于 2H 堆积模式, 这种 3R 堆积模式具有高度的不对称性, 表现出奇特的二次、三次光谱共振效应, 在非线性光学领域有重要应用。

关键词: 二维纳米材料, 化学气相沉积方法, 熔融玻璃, 过渡金属硫族化合物

D05-PO-07

Engineering of Amorphous Polymeric Insulators for Organic Field-Effect Transistors

姜莹莹¹, 陈金佯¹, 杨杰², 孙云龙¹, 施龙献¹, 冉洋¹, 张卿松¹, 易院平¹, 郭云龙¹, 刘云圻¹

1.中国科学院化学研究所

2.华中科技大学

We develop a bis-diketopyrrolopyrrole (2DPP) acceptor by “acceptor dimerization” strategy. Copolymers of 2DPP and benzothiadiazole (BTz) derivatives, P2DPP-BTz and P2DPP-2FBTz, are designed for ambipolar field-effect transistors (FETs). Both the polymers exhibit narrow optical bandgaps of ca. 1.30 eV. The strong electron-withdrawing property of 2DPP results in low-lying lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energy levels of the polymers, improving the electron mobilities. 2D grazing incident X-ray diffraction and atomic force microscopy indicate that P2DPP-BTz exhibit small π - π stacking distance of 3.59 Å and smooth interface, thus promoting high mobilities. To take full advantage of flexibility of organic semiconductors, flexible FETs were fabricated on poly (ethylene-terephthalate) (PET) substrates. FETs based on P2DPP-BTz show high performance with hole and electron mobilities of 1.73 and $2.58 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, respectively. Our results demonstrate that 2DPP acceptor is a promising building block for high-mobility ambipolar polymers.

Key words: bis-diketopyrrolopyrrole, “acceptor dimerization” strategy, field-effect transistor, ambipolar poly

D05-PO-08

基于生物材料的有机场效应晶体管

施薇, 郭云龙, 刘云圻

中国科学院化学所

进入 21 世纪, 科学研究取得了突飞猛进的发展, 尤其是电子科学技术的发展与人类生活的互融, 让社会文明日新月异。目前, 家庭电子设备的远程生物调控以及人体健康监测与日常电子设备的匹配与兼容性已经越来越普及。例如, 声音唤醒智能台灯以及个体面部或指纹识别手机, 以及智能手机或智能手表对血压与心跳的监测。而这些电子设备的实现均离不开有机场效应晶体管 (Organic field-effect transistor, 简称 OFET) 的发展。

基于 OFET 的生物传感器由于具有多参数可调控和栅压可调控的特性而受到了广泛的关注。然而, 随着 OFET 的迅速发展, 使用有机材料所带来的环境污染问题已经不容小觑。在过去的半个世纪, 聚合物材料产品已从 130 万吨跃然升至 2.9 亿吨, 这带来的垃圾处理问题已严重威胁到基于有机聚合物材料的有机光电子领域的发展。现代社会的一台笔记本电脑或者一台小小的手机都可超越八九十年代生产的一部汽车的内置能量消耗。因此近年来, 人们逐渐将具有生物可降解性、生物相容性、生物可吸收性甚至机体可代谢的生物材料或仿生类材料引入 OFET 传感器, 以期与可持续性发展的研究目标相契合。

我们采用生物材料丝蛋白作为绝缘层, 以达到制备柔性和生物可降解 OFET 器件的目的。首先, 通过水解提纯市售的蚕茧, 得到丝素蛋白。然后, 通过采用真空低温烘干法浓缩所得的稀溶液, 得到所需浓度的丝素蛋白溶液。旋涂丝素蛋白溶液制备绝缘层。

关键词: 生物材料, 有机场效应晶体管

D05-PO-09

二维 TMDCs 及其异质结的可控制备

付磊

中国科学院化学研究所

在二维晶体材料这一新兴材料家族中, 过渡金属硫族化合物 (transition metal dichalcogenides, TMDCs) 具有丰富的化学组成与材料特性, 近几年来成为低维材料研究领域的新热点。由于这类材料的能带结构及本征性质与其层数, 应力, 掺杂等因素密切相关, 所以材料的可控制备和结构设计对其性质及性能研究至关重要。我们首次通过范德华外延的方法成功制备出少层及单层 HfS_2 晶体, 并基于此搭建了具有超高开关比的场效应晶体管和超高响应度的近红外光电晶体管。此外, 通过抗硫化基底设计直接构建了 $\text{MoS}_2/\text{h-BN}$ 异质结构, 实现了对 MoS_2 本征光致发光性质的直接观察。本次报告将主要介绍 HfS_2 , MoS_2 等二维半导体材料的可控制备、结构设计及其性能研究等工作。

D05-PO-10

含氟官能团在有机场效应晶体管中的合成与性质研究

冉洋, 郭云龙, 刘云圻

中国科学院化学研究所

高迁移率、可溶液法加工的 n-type 有机场效应晶体管是目前研究的热门方向之一。相比于 p 型晶体管, n 型的有机场效应晶体管研究是相对滞后的, 其中一个主要原因就是传统的 donor-acceptor 体系中, donor 单体的能级过高, 无法实现 n 型聚合物所要求的较低的 LUMO 轨道能级。而解决上述问题的一个途径就是向 donor 中引入吸电子官能团, 传统的策略是引入氟原子或者氰基等吸电子基团。引入氟原子, 由于 F 原子有 p- π 反馈, 使得其吸电子性能并不是很强, 同时, 引入氰基, 也会降低分子的溶解性, 因此, 这两种策略都具有各自的缺陷。含氟官能团的引入具有同时解决上述两种问题的可能性, 我们由此考虑寻找合适的策略来引入含氟官能团, 并考察其在有机场效应晶体管中的性质。

D05-PO-11

基于窄带隙聚合物材料的有机光探测器

李清源, 郭云龙, 刘云圻

中国科学院化学研究所有机固体实验室

从 780 nm 到 2500 nm 的近红外光载有重要的信息, 在诸如电信 (1300-1600 nm), 生物成像 (组织透明窗口, 700-1000 nm) 和太阳能电池 (800-2000 nm) 等领域具有重要的应用。目前, 商业近红外光探测器主要采用外延生长的无机半导体材料如 InGaAs 。然而, 高的制造成本, 复杂的生产过程和差的机械柔韧性限制了这类探测器的广泛应用。基于有机材料的近红外光探测器被认为是替代传统无机光探测器的潜在候选者。而相比于有机小分子材料, 聚合物材料通常表现出更广的吸收范围 (尽管有一些例外), 可以通过降低带隙来使基于此类材料的光探测器的探测光谱范围覆盖到第一近红外区。因此, 基于窄带隙的聚合物材料在有机近红外光电探测器中具有巨大的应用潜力。我们基于本实验室合成的窄带隙材料, 成功制备了一个

近红外光敏感的光探测器，其光谱响应范围可以达到 1000 nm，在-1 V 的偏压下，此探测器在室温环境下对 850 nm 近红外光的比探测率大于 1012 Jones。

关键词：窄带隙材料，近红外材料，有机光探测器

D05-PO-12

光响应性聚合物半导体材料

孙云龙，郭云龙，刘云圻

中国科学院化学研究所

聚合物半导体材料具有较好的溶液可加工性和柔性，价格低廉，质量轻，制备工艺简单等优势，在柔性电子器件和有机太阳能电池等方面表现出相当吸引人的潜在应用。目前利用光响应性研究聚合物半导体材料的自组装的应用尚且较少，制备的材料具有的迁移率等性能较低。我们设计和合成了一种新型的基于吡咯并吡咯二酮 (DPP) 的单体，利用 stille 偶联反应，引入光响应性基团，可以得到聚合物 PDPP-TT。该聚合物在紫外光的照射下，紫外可见光吸收光谱最大吸收峰光度明显降低，由于自组装的形貌产生一定变化，迁移率发生显著的降低。此外，该聚合物还表现出对紫外光存储的性质，这一新颖的聚合物半导体材料可能是一种潜在的光存储聚合物半导体材料。

关键词：聚合物，响应性，存储

D05-PO-13

基于三轨道分子结的外磁场单向调控的双极自旋过滤器设计

熊永臣¹，周望怀¹，张传坤¹，李伟¹，Amel Laref^{1,2}

1.湖北汽车工业学院

2.沙特阿拉伯国王大学

分子结被看做是分子自旋电子学器件的基础及关键结构。在这类结构中获取自旋极化电流是量子计算及量子信息中的重要命题之一。在本文中，通过采用一个并联三轨道分子结我们发现，当轨道之间的隧穿效应足够强烈时，可以获得双极自旋过滤效应，即当外磁场单方向地调控到不同的区间，可以分别获得自旋向上及向下的极化电流，且极化效率均能够达到 100%。理论研究表明，塞曼效应及成键轨道与反键轨道之间的电荷选择性占据与该双极自旋过滤效应的形成密切相关。此外，研究还发现，该结论具有很强的普适性，适用于强关联极限下的除粒子-空穴对称点之外的所有能级范围。

关键词：分子自旋电子学器件，双极自旋过滤器，分子结，自旋极化输运，数值重整化群方法

D05-PO-14

铜膜表面 Cu-HHTP 导电 MOF 的水热法生长

杜星，刘云圻，武斌

中国科学院化学研究所

导电金属有机骨架 (Metal Organic Frameworks, MOFs) 作为新出现的一类半导体材料，具有有序孔道结构、丰富可设计的晶体结构、可调的电荷传输路径以及电子能带结构等优势，有望作为一种理想的活性沟道材料应用于场效应晶体管 (Field-Effect, FETs)。目前这种 MOF 薄膜主要是通过界面合成法制备，当其应用于 FETs 时，通常需要转移到 Si/SiO₂ 衬底上，在转移过程中会存在一些无法避免的薄膜破损及褶皱等现象。基于此，我们采用热蒸发在 Si/SiO₂ 衬底上沉积不同厚度的 Cu 膜，并利用 2,3,6,7,10,11-六羟基并三苯 (HHTP) 水溶液，通过水热法直接在 Cu/Si/SiO₂ 基底上 Cu-HHTP 纳米线薄膜。结果显示，该纳米线具有六角形层状结构，结晶性良好。此外，实验结果还说明水分子在 MOF 形成过程中起到了配位作用，HHTP 配体乙醇溶液在 Cu 膜表面无法生长该 MOF 薄膜。

关键词：有机金属框架材料，导电，薄膜

D05-PO-15

多刺激荧光响应聚合物的设计合成及性质研究

晁单明

吉林大学化学学院

随着材料科学的发展，人们对荧光聚合物的需求日渐增强，这就促进了智能荧光聚合物的的发展，尤其是刺激荧光响应型

聚合物。目前研究者主要研究光、电、pH 值、压力、热、磁以及化学品等外界刺激对聚合物荧光性质的影响。刺激荧光响应型聚合物在实际使用过程中面临异常复杂的环境，多种因素都可能对材料产生干扰。从而制备出能够适应外界复杂环境的多刺激荧光响应聚合物材料，进一步拓宽荧光聚合物材料的应用成为研究者亟待解决的问题。本文通过分子设计，将苯胺基双胺单体，9,9-双(4-氨基苯基)芴，4,4'-偶氮二苯胺和 1,2,4,5-环己烷四甲酸二酐通过共聚合反应，制备出功能性聚酰胺酸材料。通过红外光谱，核磁等手段对聚合物的结构进行了表征。研究发现，该聚合物具有良好的溶解性，优异的热稳定性及可逆的电化学活性。该刺激响应聚合物体系中，苯胺齐聚物和偶氮苯基团共同作为敏感基团，芴作为荧光发射基团。研究发现，该聚合物薄膜对电压，酸碱度，氧化还原性物质和紫外/可见光等多种刺激展示出了可逆的荧光响应特性。

关键词：刺激响应，电致变色，电控荧光，导电高分子

D05-PO-16

吸电子官能团的引入对共轭聚合物电学传输性能的影响

施龙献，郭云龙，刘云圻

中国科学院化学研究所

近年来，D-A 型聚合物半导体材料在场效应晶体管领域已经被广泛研究。为实现优异的电学传输性能，需要聚合物中电子给体和受体单元间较好的能级匹配。其中，在共轭聚合物中引入吸电子基团 F 原子可以有效地调控分子能级，从而对共轭聚合物的电子传输性能产生影响。其中氟代的异靛蓝聚合物材料已经被证明具有良好的电学传输性能。相比于卤素原子，氰基等强吸电子官能团具有更强的吸电子能力，其对共轭聚合物电子传输性能的影响仍待进一步研究。本课题组将强吸电子基团如氰基等引入到单体分子中，与传统明星分子 DPP 聚合，得到 PDPP-Sx 一系列聚合物，研究其电学性能。该工作有利于进一步理解吸电子官能团的引入对共轭聚合物电学传输性能的影响。

关键词：吸电子基团，D-A 型聚合物，DPP

D05-PO-17

石墨烯生长基底：金属铜的晶面识别以及单晶铜的制备

张家宁，武斌，刘云圻

中国科学院化学研究所

石墨烯自问世以来，其受到国内外科学家的广泛关注。目前，采用化学气相沉积（CVD）的方法可以制备出高质量、大面积的石墨烯。然而，生长基底金属铜的晶界上会产生大量成核点，以及不同铜晶面会产生不同晶面取向的石墨烯，因此在生长的石墨烯薄膜中会存在大量晶界。进而，石墨烯的晶界会极大的降低其电学性质，影响其在应用方面的潜力。因此，制备大面积、高质量单晶铜对于制备高质量、大面积的石墨烯至关重要。由多晶铜转变为特定晶面的单晶铜是一个极其复杂而又繁琐的过程。然而，单晶铜的生产对于单晶石墨烯的制备及其在其他领域的应用起着决定性的作用。近两年来，仅有少量文献报道制备单晶铜晶面，而且其中变化的机理尚不明确，许多问题亟待解决。此外，目前对于金属铜晶面表征手段主要为电子背散射衍射分析（EBSD），该手段精度高，但耗时长，操作繁琐，且只能依靠于扫描电镜。因此，发展出一种快速、简便的检测铜晶面的方法对于扩大金属铜在各个领域的应用具有重大意义。在此，我们采用高温退火的方法成功制备出了大面积单晶铜，并对其进行了 X 射线衍射与电子背散射衍射表征。另外，我们发展出了一种“氧化法”来快速、准确的检测铜的三个低阶晶面（100）（110）与（111），并且阐述了相应的机理。

关键词：单晶铜，铜晶面，石墨烯，高温退火

D05-PO-18

利用 OFET 对农药分子的识别与测定

张云鹏^{1,2}，刘云圻²

1.中国农业大学（西区）

2.中国科学院化学研究所

OFET 为人们提供了一种新的检测思路，利用三端器件中栅电极对于源漏电流的调控作用，再对器件栅端电极进行修饰之后，能够将各种化学，物理，生物信号转变为电信号，从而方便快捷的对于各种测试物进行监测和检测。我们通过修饰杯芳烃，环糊精等笼状分子，使之对不同类型的农药分子具有特异的响应性，再将之修饰至晶体管中的栅电极或半导体层之后，利用其对不同农药分子引起的化学信号的改变对电流的影响，判断出所检测的农药分子浓度和类别，该体系相对于传统的液

相、气质等检测手段来说，在测试物方面用量更少，检测更加灵敏，响应迅速并能快速确定结果，在能耗方面则更加绿色，经济环保，耗费人力物力都较以前更少。

关键词：OFET，农药检测，经济绿色

D05-PO-19

新型全共轭共价有机框架的设计合成及性能研究

张卿蕊

中国科学院化学研究所

设计发展用于全共轭二维共价有机框架材料的新型偶联基团和可逆偶联反应，合成了具有新型结构的共价有机框架材料合成子，经过界面自组装得到结晶性较好，可以直接透射电子显微镜高分辨成像的二维共价有机框架薄膜，薄膜经测试具有一定的电学性质。

关键词：全共轭二维共价有机框架，透射电镜高分辨成像

D05-PO-20

高迁移率葱衍生物发光半导体材料与器件

刘洁¹，董焕丽¹，江浪¹，胡文平²

1.中国科学院化学研究所

2.天津大学理学院

有机光电材料的发展不仅给有机光电器件提供了更多的研究素材，其性能的不断优化也促进着有机器件的应用，但同时新的器件结构对材料也提出了新的要求。例如，有机发光晶体管与有机电泵激光器，不仅要求其功能层材料具有发光的特性还要求其具有一定的电荷传输特性，甚至是双极性传输特性。因此，设计合成高迁移率发光半导体材料也成为材料领域的研究热点。

我们以具有晶态发光特性的葱为中心，通过在不同反应位点引入芳香取代基获得了一系列同时具有晶态荧光与场效应特性的材料；通过总结归纳材料的结构与性能关系，我们发现 2, 6-位芳香取代能够有效构筑高迁移率发光葱衍生物，且相较于 H-聚集和 X-聚集类材料，J-聚集形态的材料体系更容易实现迁移率与发光效率的统一。

D05-PO-21

Correlation between molecule structure and charge transport properties: a few case studies in organic field-effect transistors

胡袁源

湖南大学物理与微电子科学学院

Understanding the relationship between molecular structure and charge transport properties has always been a huge concern in the research of organic electronics. Over the past few decades, our understanding of the relationship between structural and electrical properties of organic semiconductors has been greatly deepened. Despite these achievements, thorough understanding of the correlation between molecular structure and charge transport properties is still not achieved. It is essential that we have a comprehensive picture of the structure-property relationship for organic semiconductors to further improve mobility. However, this is a very challenging task since the effects of molecule structure on charge transport can be so complicated.

Here we report the study of structure-property correlation by showcasing a few studies in which the molecule structure of organic semiconductors was finely tuned and the corresponding performance of organic field-effect transistors (OFETs) was compared. Specifically, we have studied how the alkyl-chain length and symmetry affect charge transport properties of small-molecule semiconductors (NDI-based small molecules) and the corresponding OFET performance. We have also investigated the effect of the donor-unit length on the charge transport properties of donor-acceptor (D-A) copolymers (NDI-based polymers). These works have clearly clarified how the aforementioned factors influence charge transport in organic semiconductors. Our work thus is enlightening for people to understand the charge transport physics in OFETs and it is also instructive for chemists to optimize the synthesis of high-mobility organic semiconductors.