

· 研究论文 ·

## 侧链调控苯并三氮唑类非富勒烯受体的结构与光伏性能

王格婧<sup>1</sup> 尤龙震<sup>1\*</sup> 刘正琪<sup>2</sup> 丁汝雪<sup>2</sup> 白栩冰<sup>2</sup> 李晓明<sup>3</sup> 蔡芸皓<sup>2\*</sup>

(<sup>1</sup>临沂大学材料科学与工程学院 临沂 276000)

(<sup>2</sup>中国科学院大学材料科学与光电技术学院 北京 100049)

(<sup>3</sup>青岛大学纺织服装学院 青岛 266071)

**摘要** 设计并合成了2种新型苯并三氮唑类非富勒烯受体材料YTz-C11和YTz-PhC6,系统研究了噻吩并噻吩单元 $\beta$ 位侧链由线性官能团(正十一烷基)替换为二维官能团(3-己基苯基)对其分子结构、物理化学性质、薄膜形貌及光伏性能的影响.理论计算表明,YTz-PhC6中苯环的引入导致2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1H-茚-1-基)丙二腈(IC)端基与分子主链间二面角显著增大(约 $7.8^\circ\sim 8.3^\circ$ ),从而优化了分子堆积行为.光谱与电化学测试显示,YTz-PhC6具有更窄的光学带隙(1.37 eV)和更低的LUMO能级(-3.82 eV).基于PBDB-T:YTz-PhC6的有机太阳能电池实现了15.87%的光电转换效率(PCE),显著高于基于YTz-C11的器件(10.67%),其优异的性能主要归因于更快速的电荷传输、更平衡的载流子迁移率( $\mu_h/\mu_e \approx 1.05$ )以及优化的纳米级相分离形貌.此外,瞬态光电测试表明YTz-PhC6器件具有更短的电荷提取时间(0.42  $\mu$ s)和更长的载流子寿命(0.95 ms).研究表明,通过在非富勒烯受体 $\beta$ 位引入二维侧链可有效调控其分子堆积与光电特性,为高性能有机太阳能电池的材料设计提供了新思路.

**关键词** 有机太阳能电池;非富勒烯受体;苯并三氮唑;侧链调控

**引用:** 王格婧,尤龙震,刘正琪,丁汝雪,白栩冰,李晓明,蔡芸皓.侧链调控苯并三氮唑类非富勒烯受体的结构与光伏性能.高分子学报,doi:10.11777/j.issn1000-3304.2026.26048.

**Citation:** Wang, G. J.; You, L. Z.; Liu, Z. Q.; Ding, R. X.; Bai, X. B.; Li, X. M.; Cai, Y. H. Side chain engineering of benzotriazole-based non-fullerene acceptors for tuning structure and photovoltaic properties. *Acta Polymerica Sinica* (in Chinese), doi:10.11777/j.issn1000-3304.2026.26048.

近年,有机太阳能电池(OSCs)发展迅速,其具备诸多优势特性,如重量轻、本征柔性及溶液可加工性<sup>[1-5]</sup>.目前,有机太阳能电池的光电转换效率(PCE)已超过20%<sup>[6-10]</sup>,这主要归功于高性能非富勒烯受体(NFAs)的出现,这类受体在化学结构、光电性质和分子排列方面具有高度可调性.目前最先进的非富勒烯受体是具有A'-DAD-A'结构特征的Y系列分子<sup>[11-13]</sup>,在其初始研究与宽禁带给体聚合物PBDB-TF结合时即实现了15.7%的效率<sup>[14-16]</sup>.此突破性成果激励研究界通过分

子结构的精细调控<sup>[17-20]</sup>、给体聚合物的适配优化<sup>[21-23]</sup>、器件工艺革新<sup>[24-27]</sup>、小分子添加剂的开发<sup>[24,28-30]</sup>,以及针对分子堆叠行为与基础原理的深入研究<sup>[31-33]</sup>,在挖掘非富勒烯受体潜力方面接连取得重要进展.

在Y系列非富勒烯受体的多种分子设计策略中,侧链修饰对于调控活性层的纳米级形貌及器件性能具有至关重要的作用<sup>[18,34,35]</sup>.以苯并噻二唑单元为核心骨架的Y系列NFAs(如Y6)<sup>[36]</sup>和以苯并三氮唑单元为核心骨架的Y系列NFAs(如

高分子优秀青年学者专题;2026-02-09收稿,2026-02-28录用,

网络出版.

基金项目:国家自然科学基金(基金号52522314,52473200),山东省自然科学基金青年基金(基金号ZR2023QB161).

\*通信联系人,E-mail:youlongzhen@lyu.edu.cn;caiyunhao@ucas.ac.cn

doi:10.11777/j.issn1000-3304.2026.26048;CSTR:32057.14.GFZXB.2026.7571

Y11)<sup>[37]</sup>已得到深入研究.可以看出, Y6类非富勒烯受体主要拥有2组烷基链: 内部烷基链位于中心吡咯环上, 外层烷基链则排列在噻吩并噻吩单元的 $\beta$ 位<sup>[13]</sup>. 通过内链修饰, 如调控Y6分子吡咯上侧链长度及支化位点, 可促使薄膜形貌得以优化, PCE提升至16.5%<sup>[38,39]</sup>. 通过外链修饰, 在Y6分子的噻吩并噻吩单元的 $\beta$ 位引入不同位置异构(邻、间、对)己苯基, 可有效改善非极性分子的光学吸收、分子间排列以及相分离效果, 使器件PCE最优提升至17.7%<sup>[13]</sup>. 此外, 通过对IC端基进行不同卤素取代, Y6系列受体得以迅速发展<sup>[34,40,41]</sup>. 其中, 含氟化和氯化2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1H-茚-1-基)丙二腈(IC)端基的Y6分子已成为目前领域内最具影响力的非富勒烯受体<sup>[40,42]</sup>. 类似的, 合理的侧链取代及IC端基的修饰同样推动了Y11家族的蓬勃发展. 如缩短Y11内侧吡咯环上的烷基侧链, 可以拓宽光谱吸收, 优化分子堆叠, 提高 $J_{SC}$ 同时增大FF, 使器件PCE提升至17.15%<sup>[43]</sup>. 二氟化IC端基构成的Y11能展现出极低的能量无序度, 使其非辐射复合导致的电压损失降至0.17 eV, PCE高达16.54%<sup>[37]</sup>. 不同位置的单溴化IC端基修饰可使器件性能表现不同程度的提升, 其中, 两IC端基 $\gamma$ 位同时被溴取代的Y11的PCE为16%, 优于 $\delta$ 位被同时取代及 $\delta$ 、 $\gamma$ 位混合取代的性能<sup>[11]</sup>.

在此工作中, 以Y11分子为基础, 设计合成

了2种新型苯并三氮唑类非富勒烯受体材料. 2种非富勒烯受体相同点为, 均在苯并三氮唑的骨架中心的 $\alpha$ 氮原子位上引入环己烷基甲基, 并在两侧IC端基靠近羰基碳原子的苯环 $\gamma$ 位碳位引入溴基取代. 2种非富勒烯受体的区别在于外链不同: 一种是噻吩并噻吩单元的 $\beta$ 位引入正十一烷基链(图1), 被命名为YTz-C11; 另一种是噻吩并噻吩单元的 $\beta$ 位引入3-己基-苯基(图1), 被命名为YTz-PhC6. 形貌分析与理论计算表明, 不同侧链构型会显著改变分子聚集行为, 进而影响2种NFA材料的物理化学特性. 其中, 含有苯环支链的YTz-PhC6基共混膜呈现出更优化的纳米级相分离、更高结晶度. 当2种NFAs材料与宽带隙给体聚合物PBDB-T共混时, 光伏器件性能呈现出明显差异. 受体为YTz-C11的器件PCE为10.67%, 而受体为YTz-PhC6的器件凭借更高且更平衡的载流子迁移率, 呈现出26.31 mA $\cdot$ cm $^{-2}$ 的短路电流密度( $J_{SC}$ )以及更高的填充因子(FF=71.07%), PCE高达15.87%. 这为设计新型高效率Y系列NFAs材料提供了新思路.

## 1 实验部分

### 1.1 材料准备

2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1H-茚-1-亚基)丙二腈、2,2'-((2Z,2'Z)-((12,13-双(2-癸基十四烷基)6-(环己基甲基)-4,8-二甲基-6,8,12,13-四氢-4H-苯

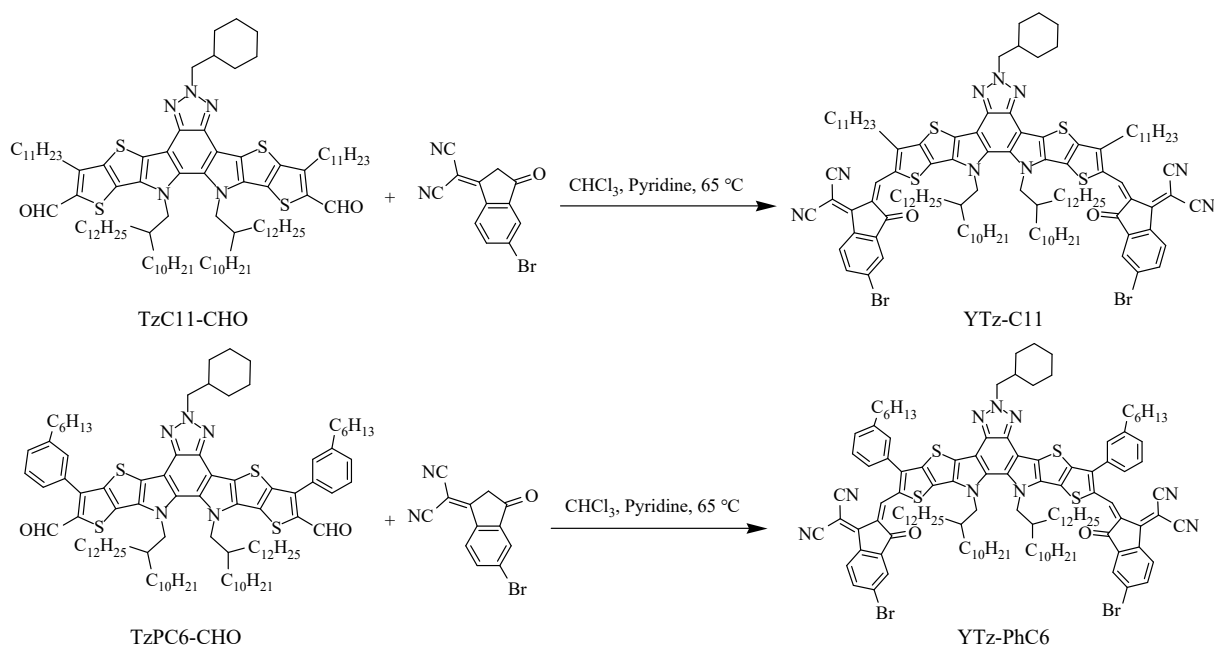


Fig. 1 Synthesis for the two NFAs.

并[1,2,3]三唑并噻吩[2'',3'':4',5']并吡咯[2',3':4,5]并吡咯[3,2-g]并噻吩[2',3':4,5]并吡咯[3,2-b]并[4,5-e]吡啶-2,10-二醛(简称为: TZC11-CHO)、6-(环己基甲基)-12,13-双(2-癸基十四烷基)-3,9-双(3-己基苯基)-12,13-二氢-6*H*-噻吩并[2'',3'':4',5']噻吩并[2',3':4,5]吡咯并[3,2-g]噻吩并[2',3':4,5]噻吩并[3,2-b][1,2,3]三唑并[4,5-e]吡啶-2,10-二醛(简称为: TZPC6-CHO)按照已报道的文献进行合成<sup>[13,44,45]</sup>.

### 1.2 小分子YTz-C11的合成

YTz-C11的合成路线如图1所示. 将化合物TZC11-CHO (124.4 mg, 0.08 mmol)和2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1*H*-茚-1-亚基)丙二腈(109.2 mg, 0.4 mmol)溶于一定量的氯仿溶液中, 向溶液中加入0.3 mL吡啶. 反应液在65 °C下反应8 h, 停止加热, 温度降至室温, 并将混合物倒入甲醇中. 沉淀物经过滤收集得到粗产物, 将所得粗产物进行硅胶柱层析, 以*V*(石油醚):*V*(二氯甲烷)=1.8:1.0为洗脱液, 得到YTz-C11 (115.7 mg, 70%). <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 298 K,  $\delta$ ): 9.18 (s, 2H), 8.56 (d, 2H), 8.02 (d, 2H), 7.85 (dd, 2H), 4.73 (d, 4H), 4.65 (d, 2H), 3.22 (t, 4H), 2.34 (m, 1H), 2.02 (m, 2H), 1.9~0.80 (m, 146H).

### 1.3 小分子YTz-PhC6的合成

YTz-PhC6的合成路线如图1所示. 将化合物TZPC6-CHO (125.4 mg, 0.08 mmol)和2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1*H*-茚-1-亚基)丙二腈(109.2 mg, 0.4 mmol)溶于一定量的氯仿溶液中, 向溶液中加入0.3 mL吡啶. 反应液在65 °C下反应8 h, 停止加热, 温度降至室温, 并将混合物倒入甲醇中. 沉淀物经过滤收集得到粗产物, 将所得粗产物进行硅胶柱层析, 以*V*(石油醚):*V*(二氯甲烷)=1.8:1.0为洗脱液, 得到YTz-PhC6 (113.0 mg, 68%). <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>, 298 K,  $\delta$ ): 8.87 (s, 2H), 8.51 (d, 2H), 8.04 (d, 2H), 7.85 (dd, 2H), 7.54 (m, 2H), 7.47 (dd, 2H), 7.45 (m, 4H), 4.78 (d, 4H), 4.58 (d, 2H), 2.76 (t, 4H), 2.26 (m, 1H), 2.09 (m, 2H), 1.76-0.80 (m, 126H).

## 2 结果与讨论

### 2.1 结构、光学与电化学性质

图2为聚合物给体(PBDB-T)和非富勒烯受体(YTz-C11和YTz-PhC6)的分子结构图. 不同的色块清晰地展示了2种受体的不同基团: YTz-C11具有2个线性的11碳烷基链, 而YTz-PhC6在相应位置采用了二维的3-己基苯基取代.

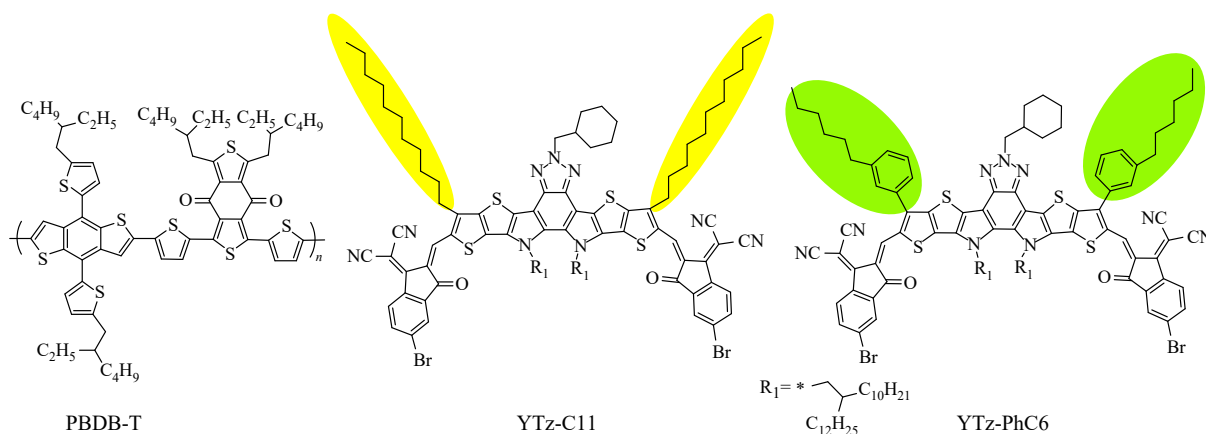
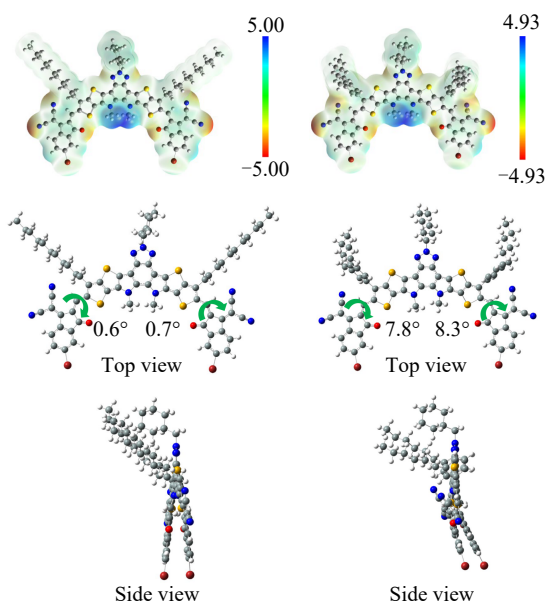


Fig. 2 Chemical structures of the donor polymer PBDB-T and the acceptor materials, YTz-C11 and YTz-PhC6 developed in this work.

为研究不同侧链对分子结构的影响, 采用密度泛函理论(DFT)计算了2种小分子受体的最优分子几何构型. 如图3所示, 所有小分子受体均呈现相似的蟹形结构. 但从侧视图可以看出, 随着线性侧链被二维侧链取代, YTz-C11分子中邻近正十一烷基侧链的2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1*H*-茚-1-亚基)丙二腈基与分子主链的二面角由

0.6°~0.7°增大至YTz-PhC6分子中邻近3-己基-苯基侧链的2-(5-溴-3-氧代-2,3-二氢-1*H*-茚-1-亚基)丙二腈基与分子主链的二面角7.8°~8.3°. 这表明由于YTz-PhC6侧链苯环的引入, 苯环对C≡N存在排斥作用, 因此IC端基与中心核骨架间出现了夹角, 这可能引起2种NFAs的共混薄膜形貌出现明显的差异.



**Fig. 3** DFT calculations of the optimized molecular geometry at B3LYP/6-31G(d,p) level of YTz-C11 and YTz-PhC6.

在浓度约为  $1 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$  的稀氯仿溶液中以及薄膜状态下测量了 PBDB-T 和 2 种受体的紫外-可见(UV-Vis)吸收光谱, 相应的光学数据列于表 1. 如图 4(a)所示, 溶液状态下, PBDB-T 的较强吸收范围为 500~650 nm, YTz-C11 和 YTz-PhC6 的吸收谱图相似, 较强的吸收范围为 600~

800 nm, 其最大吸收峰分别位于 762 和 759 nm, 溶液状态下, YTz-C11 产生聚集, 吸收比 YTz-PhC6 轻微红移, 相比之下, YTz-PhC6 发生了蓝移. 固态薄膜状态下(图 4(b)), 受体材料 YTz-C11 和 YTz-PhC6 的较强的吸收波长范围展宽至 600~920 nm, 最大吸收峰分别红移至 827 和 830 nm, 表明其固态分子间相互作用显著增强. 这种约 70 nm 的红移吸收特性使其能有效利用光子, 使给受体的吸收波长互补性变好. 650 和 730 nm 处 YTz-PhC6 材料相比于 YTz-C11 出现了显著增强且红移的肩峰, 表明了含苯环的支链的引入改变了共轭的受体分子间的聚集程度, YTz-PhC6 产生更加有序的堆积, 吸收红移. 通过计算 YTz-C11 和 YTz-PhC6 薄膜的吸收起始点( $\lambda_{\text{onset}}$ )所得到的光学带隙( $E_{\text{g}}^{\text{opt}}$ )分别为 1.39 和 1.37 eV, 由于聚合物给体 PBDB-T 的吸收主要集中在 450~680 nm 范围内, 所以 2 种非富勒烯受体与给体互补的吸收光谱能够提供宽广且高效的吸收, 从而用于构建有机太阳能电池. 图 4(c)显示, 混合膜 PBDB-T:YTz-PhC6 相比于 PBDB-T:YTz-C11 出现了红移, 表明侧链上的苯环的引入影响了分子间的  $\pi$ - $\pi$  堆叠结构, 也与其受体的光学带隙由 1.39 eV 减小至 1.37 eV 的变窄的结果一致.

**Table 1** The optical and electrochemical properties of YTz-C11 and YTz-PhC6.

| Acceptors | $\lambda_{\text{max}}$ (nm) |      | $E_{\text{g}}^{\text{opt}}$ <sup>a</sup> (eV) | $E_{\text{HOMO}}/E_{\text{LUMO}}$ <sup>b</sup> (eV) | $E_{\text{g}}^{\text{CV}}$ <sup>c</sup> (eV) |
|-----------|-----------------------------|------|---|---|--|
|           | Solution                    | Film |   |   |  |
| YTz-C11   | 762                         | 827  | 1.39  | -5.62/-3.79   | 1.83   |
| YTz-PhC6  | 759                         | 830  | 1.37  | -5.57/-3.82   | 1.75   |

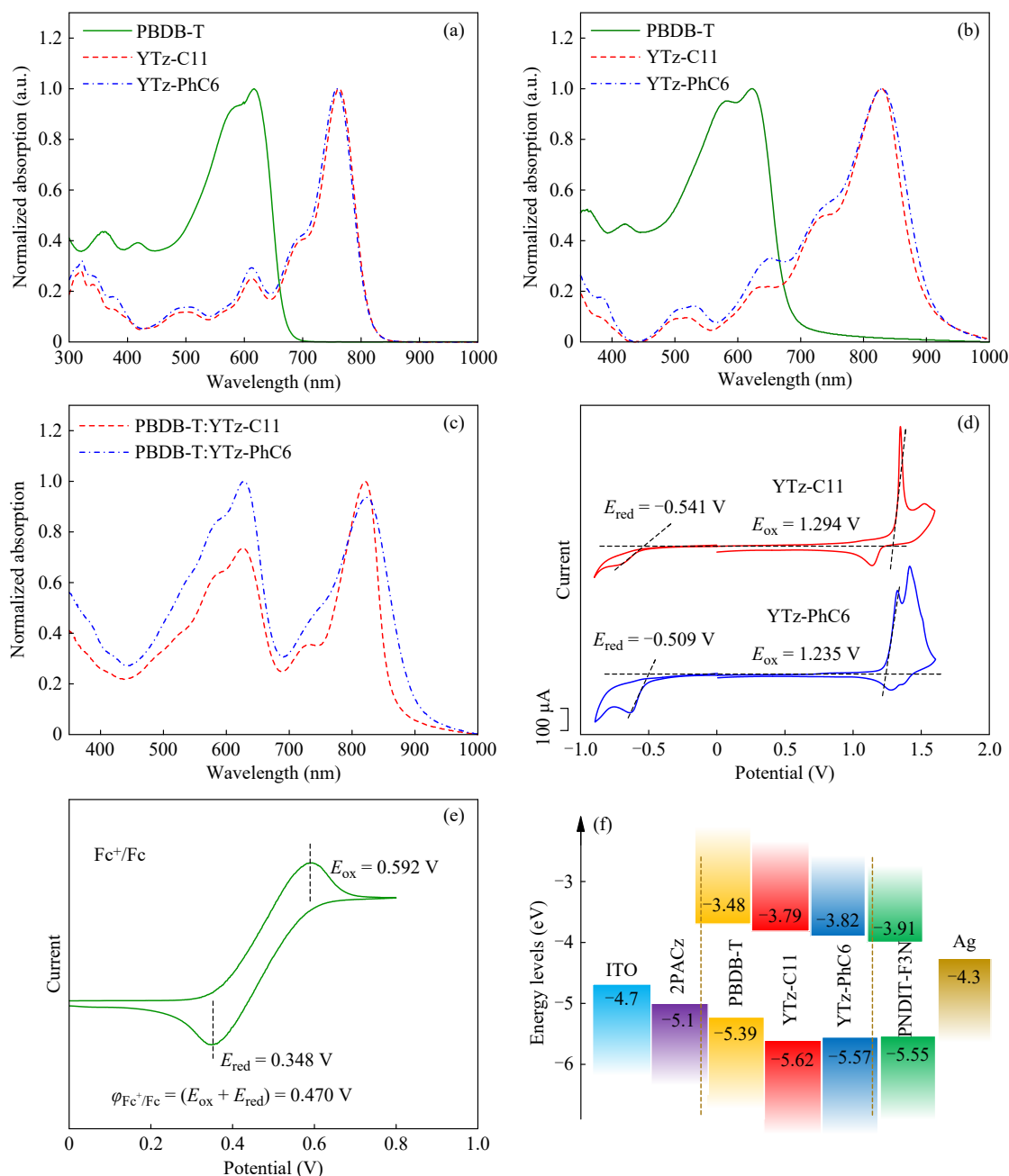
<sup>a</sup> Estimated from the onset absorption of thin films  $E_{\text{g}}^{\text{opt}} = 1240/\lambda_{\text{onset}}$ ; <sup>b</sup> Calculated from the onsets of reduction/oxidation potentials; <sup>c</sup> Calculated from  $E_{\text{g}}^{\text{CV}} = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$ .

2 种非富勒烯受体的最高占据分子轨道(HOMO)和最低未占分子轨道(LUMO)能级通过循环伏安法依据以下公式进行测定:  $E_{\text{HOMO/LUMO}} = -e(E_{\text{ox}}/E_{\text{red}} - \phi_{\text{Fc}^+/\text{Fc}} + 4.8)$  (eV) <sup>[46]</sup>. 其中,  $E_{\text{ox/red}}$  代表 NFAs 首次氧化/还原峰的起始电位, 计算方法为氧化、还原电流峰的起始切线与横坐标(电流为 0)的交点电位. 由图 4(d)可知, YTz-C11 的  $E_{\text{ox}}$  和  $E_{\text{red}}$  分别为 1.294 和 -0.541 V, YTz-PhC6 的  $E_{\text{ox}}$  和  $E_{\text{red}}$  分别为 1.235 和 -0.509 V.  $\phi_{\text{Fc}^+/\text{Fc}}$  为电化学测量体系中二茂铁离子/二茂铁电对的氧化还原电位, 本测试中其值测定为 0.47 V (图 4(e)). 二茂铁离子/二茂铁的能级取为真空能级以下 4.8 eV. 能级图如图 4(f)所示, 计算得到的 YTz-C11 和 YTz-

PhC6 的  $E_{\text{HOMO}}/E_{\text{LUMO}}$  值分别为 -5.62/-3.79 和 -5.57/-3.82 eV. 与 YTz-C11 相比, YTz-PhC6 表现出略窄的电化学带隙, 这与观察到的 YTz-PhC6 吸收红移相符. YTz-C11 具有较高的最低未占分子轨道(LUMO)能级, 有利于在 OSCs 中获得较高的开路电压( $V_{\text{oc}}$ ). 尽管 YTz-PhC6 的  $V_{\text{oc}}$  可能低于 YTz-C11, 但其在可见区具有更宽的吸收范围, 有利于实现更高的  $J_{\text{sc}}$ . 因此, 这些结果表明, 在 NFAs 分子相同位置进行不同侧链取代对其电化学性质有显著影响.

## 2.2 光伏特性

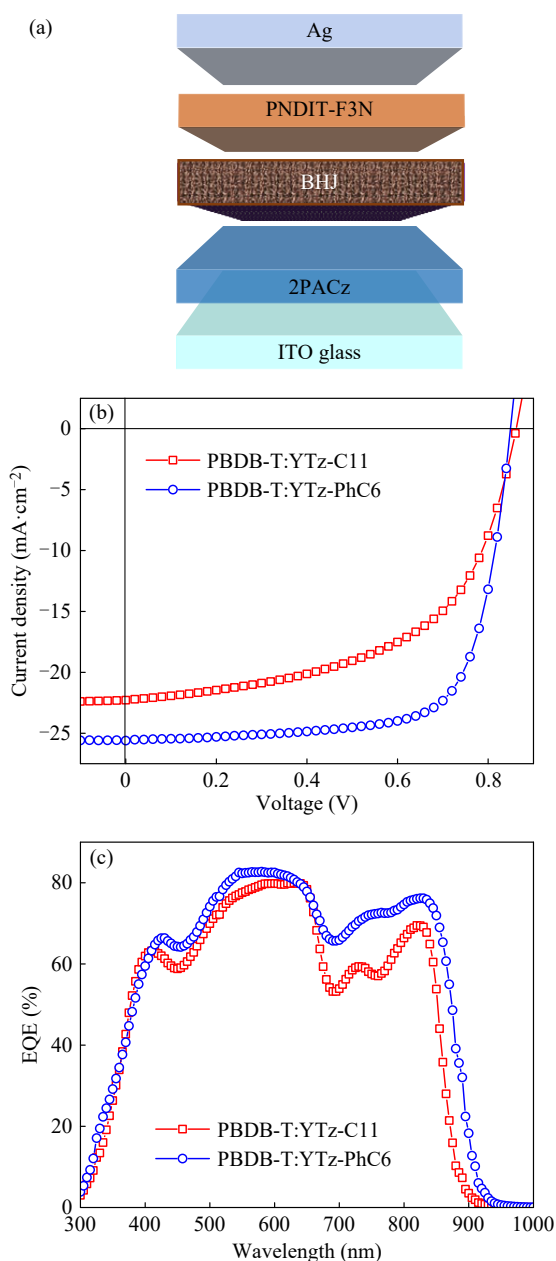
为了系统评估 YTz-C11 和 YTz-PhC6 的光伏性能, 采用了传统的器件结构 ITO/2PACz/活性



**Fig. 4** (a) Normalized UV-Vis absorption spectra of the donor and acceptors in chloroform solution with a concentration of about  $1 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ ; (b) Normalized UV-Vis absorption spectra of the donor and acceptors as thin films; (c) Normalized UV-Vis absorption spectra of the blended films; Cyclic voltammogram (CV) curves of (d) NFAs and (e)  $\text{Fc}^+/\text{Fc}$ , respectively, scan rate:  $10 \text{ mV/s}$ ; (f) Energy level diagram of the related materials used in the OSC devices.

层/PNDIT-F3N/Ag (图 5(a))来制备 OSC。2PACz 被用作空穴传输层,以增强内建电场、抑制表面缺陷降低激子复合,并诱导有序分子堆叠<sup>[47]</sup>。活性层(PBDB-T:YTz-C11 (YTz-PhC6)共混物)在质量比(1:1)、总浓度为  $14 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$  的氯仿溶液中旋涂成膜,随后在  $100^\circ\text{C}$  下热退火  $5 \text{ min}$ 。PNDIT-F3N 作为电子传输层以降低界面能垒促进电子提取<sup>[48]</sup>。图 5(b)展示了器件的典型电流密度-电压( $J$ -

$V$ )曲线,相应的器件参数列于表 2。尽管 PBDB-T:YTz-C11 器件实现了最高的  $V_{\text{OC}}$  ( $0.862 \text{ V}$ ),这与它的  $E_{\text{LUMO}}$  值非常吻合,但其  $J_{\text{SC}}$  ( $22.29 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ )和 FF( $55.56\%$ )相对较低,导致 PCE 为  $10.67\%$ 。对于 PBDB-T:YTz-PhC6,获得了显著改善的 PCE ( $15.87\%$ ),同时  $V_{\text{OC}}$  为  $0.848 \text{ V}$ ,  $J_{\text{SC}}$  为  $26.31 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ ,并且 FF 显著提升至  $71.07\%$ 。相应器件的外部量子效率(external quantum efficiency, EQE)曲



**Fig. 5** (a) Schematic device configuration used in this work; (b) Optimized  $J$ - $V$  curves under AM 1.5G illumination; (c) EQE curves of the corresponding optimized devices.

**Table 2** Summary the photovoltaic parameters of the optimized devices based on YTz-C11 and YTz-PhC6 under standard AM 1.5G illumination,  $100 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$ .

| Acceptors | $V_{\text{OC}}$ (V) | $J_{\text{SC}}$ ( $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ ) | FF (%)             | PCE <sup>a</sup> (%) |
|-----------|---------------------|--|--------------------|----------------------|
| YTz-C11   | 0.862 (0.859±0.002) | 22.29 (22.05±0.21)                                   | 55.56 (54.22±1.26) | 10.67 (10.31±0.26)   |
| YTz-PhC6  | 0.848 (0.844±0.003) | 26.31 (26.06±0.20)                                   | 71.07 (69.32±1.33) | 15.87 (15.37±0.24)   |

<sup>a</sup> The average parameters were calculated based on 10 independent cells.

为深入阐释有机太阳能电池中的电荷提取与复合动力学过程, 我们开展了瞬态光电流(TPC)与瞬态光电压(TPV)测试. 激发光源采用LED光源, 光强设置为100% (1 sun), 脉冲宽度为5.00  $\mu\text{s}$ ,

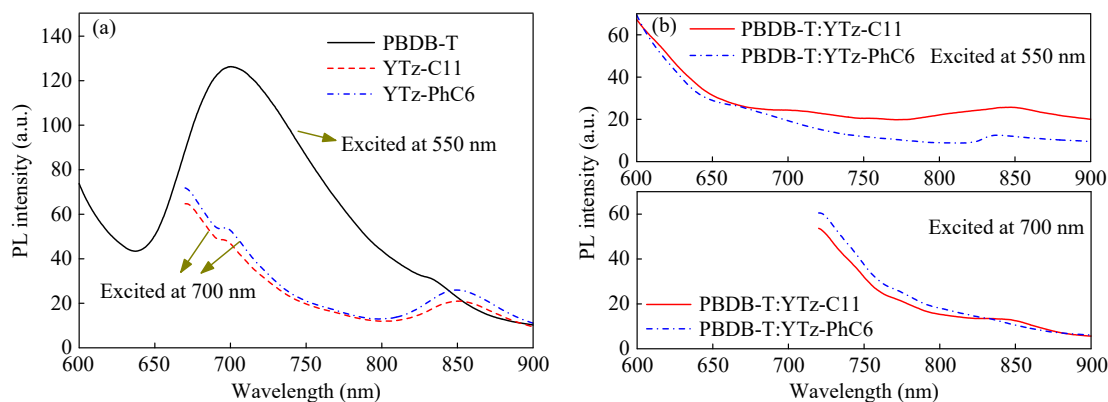
线如图5(c)所示. 基于PBDB-T:YTz-PhC6的器件在300~900 nm的范围内都具有高且宽的光响应, 并且相应器件的最高EQE值超过80%. 在650~900 nm范围, PBDB-T:YTz-PhC6的器件的EQE显著高于PBDB-T:YTz-C11, 这是其器件获得高 $J_{\text{SC}}$ 的重要原因之一. 这表明YTz-PhC6的苯环侧链的作用能够增强其在固态下的 $\pi$ - $\pi$ 堆叠, 有利于电荷传输.

为阐明OSC的能量转移机制, 进行了荧光光谱(PL)测试(图6). PBDB-T的PL光谱在激发波长为550 nm时出现较强峰, YTz-C11和YTz-PhC6在激发波长为700 nm时出现较强峰(图6(a)). 在PBDB-T:YTz-C11和PBDB-T:YTz-PhC6二元共混体系中, 各采用550和700 nm波长激发(图6(b)), 2种激发波长下均未观测到较强峰, 这表明从PBDB-T向YTz-C11和YTz-PhC6发生了明显能量转移现象. 值得注意的是, 在800~900 nm范围内, PBDB-T:YTz-PhC6相比于PBDB-T:YTz-C11没有出现明显峰强度, 表明PBDB-T更倾向于向YTz-PhC6发生能量转移, 这是PBDB-T:YTz-PhC6器件PCE更高的原因之一.

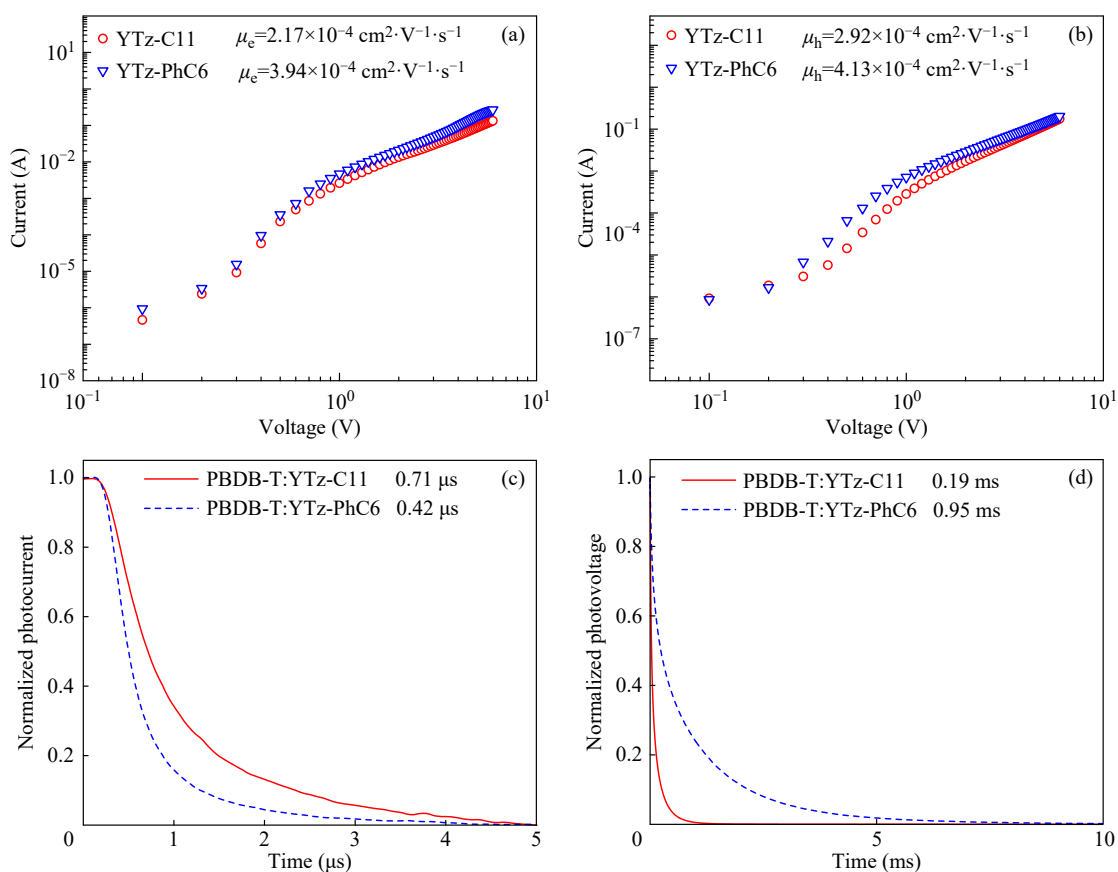
### 2.3 空穴/电子迁移率

采用空间电荷限制电流(SCLC)法研究了不同器件的电荷传输特性, 以探究空穴和电子迁移率. 电流密度的与电压的依赖关系如图7(a)和7(b)所示. PBDB-T:YTz-C11和PBDB-T:YTz-PhC6的空穴/电子迁移率分别为 $2.92 \times 10^{-4} / 2.17 \times 10^{-4}$ 和 $4.13 \times 10^{-4} / 3.94 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 对应的电子/空穴迁移率之比( $\mu_{\text{h}}/\mu_{\text{e}}$ )分别为1.35和1.05. 更平衡的电子/空穴迁移率有助于电荷传输, 即 $\mu_{\text{h}}/\mu_{\text{e}}$ 越接近1, 电荷传输性能越优. 基于PBDB-T:YTz-PhC6的器件表现出更高的且更平衡的迁移率, 这有助于获得更高的短路 $J_{\text{SC}}$ 和FF.

脉冲前后稳定时间分别为10 ms (settling time)和20 ms (follow-up time). TPV在开路条件下测试, TPC在短路条件下测试, 无偏置. 测试时器件封装处于室温空气中. TPC结果显示, PBDB-T:YTz-



**Fig. 6** PL curves of PBDB-T (excited at 550 nm), YTz-C11 (excited at 700 nm) and YTz-PhC6 (excited at 700 nm) neat films; PL curves of PBDB-T:YTz-C11 and PBDB-T:YTz-PhC6 blend films (both blend films excited at 550 nm and 700 nm).

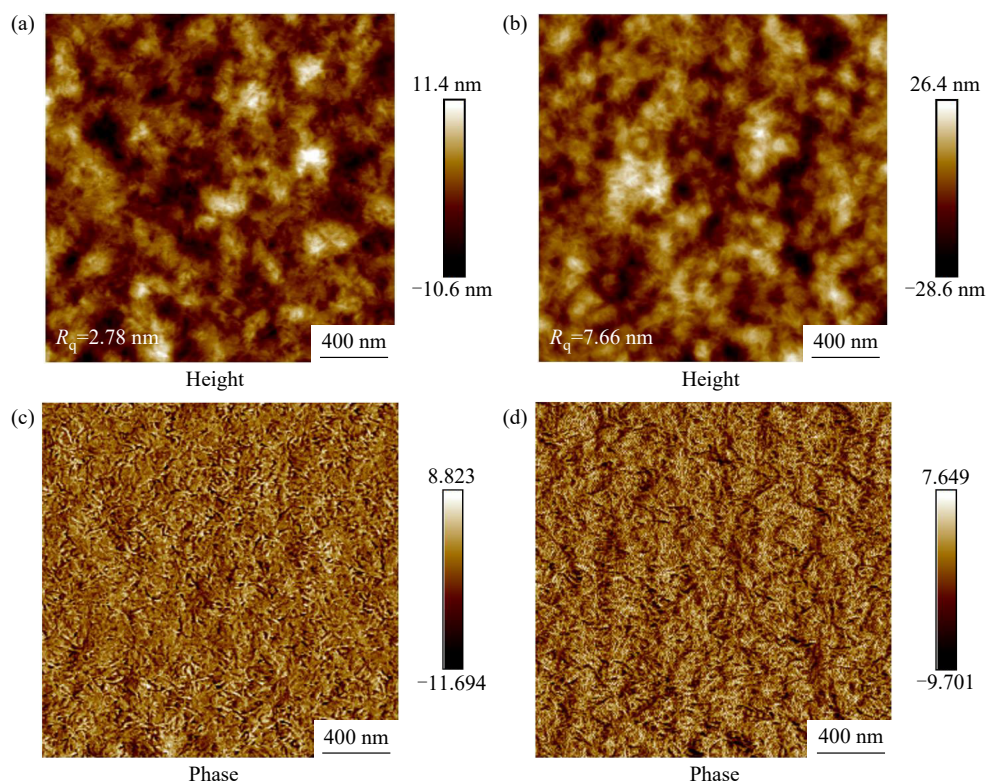


**Fig. 7** (a)  $J$ - $V$  characteristics of electron-only devices based on the blend films; (b)  $J$ - $V$  characteristics of hole-only devices based on the blend films; (c) Normalized TPC decays of the OSCs; (d) Normalized TPV decays of the OSCs.

C11 器件的电荷提取时间约为  $0.71 \mu\text{s}$ ，明显长于 PBDB-T:YTz-PhC6 ( $0.42 \mu\text{s}$ ) 器件(图 7(c)). 相应的 TPV 测试表明，PBDB-T:YTz-C11 器件的载流子寿命为  $0.19 \text{ ms}$ ，而基于 PBDB-T:YTz-PhC6 的器件的载流子寿命长达  $0.95 \text{ ms}$  (图 7(d)). PBDB-T:YTz-PhC6 器件中同时实现的更长载流子寿命与更短电荷提取时间，有利于实现高效电荷提取，是此类器件性能提升的重要原因。

## 2.4 形貌研究

利用原子力显微镜(AFM)表征了共混薄膜的形貌，以验证不同侧链对形貌的影响(图 8). 所有共混薄膜的高度图(图 8(a)和 8(b))和相图(图 8(c)和 8(d))中均观察到纤维状结构，共混薄膜表面均匀无异常大的聚集物形成. 图 8(a)显示，PBDB-T:YTz-C11 薄膜表面较为平整，其均方根粗糙度较小，为  $2.78 \text{ nm}$ . 图 8(b)显示，PBDB-T:YTz-PhC6



**Fig. 8** AFM height images ( $2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ ) of blend films: (a) PBDB-T:YTz-C11 and (b) PBDB-T:YTz-PhC6, AFM phase images ( $3\ \mu\text{m} \times 3\ \mu\text{m}$ ) of blend films: (c) PBDB-T:YTz-C11 and (d) PBDB-T:YTz-PhC6.

薄膜均方根粗糙度为7.66 nm，其相图中可见清晰的纳米纤维结构，表明其结晶性优于PBDB-T:YTz-C11，这有利于电荷分离与传输。通过对比图8(c)和8(d)，可以看出PBDB-T:YTz-C11薄膜的相分离程度更大，而适当相分离为高效的电荷分离提供了更多的给体-受体界面，从而解释了在其相关器件中产生了更好的 $J_{\text{SC}}$ 和FF。

### 3 结论

以Y11分子为基础，通过在主链噻吩并噻吩单元的 $\beta$ 位引入线性正十一烷基和二维3-己基-苯基2种侧链，合成了2种非富勒烯受体，分别命名为YTz-C11和YTz-PhC6，并系统研究了侧链取向对其光电性质与分子聚集行为的影响。受到侧链3-己基苯基中苯环对 $\text{C}\equiv\text{N}$ 的排斥作用，YTz-PhC6中IC端基与分子主链之间产生约 $7.8^\circ\sim$

$8.3^\circ$ 的二面角，显著大于YTz-C11中对应的二面角仅为 $0.6^\circ\sim 0.7^\circ$ ，这种差异影响了分子在固态下的堆积方式。YTz-PhC6在薄膜状态下吸收光谱出现红移， $E_{\text{g}}^{\text{opt}}$ 降至1.37 eV，低于YTz-C11的1.39 eV。循环伏安测试表明，YTz-PhC6具有更低的LUMO能级(-3.82 eV)。基于YTz-C11器件的PCE仅为10.67%，而基于YTz-PhC6的器件实现了高达15.87%的PCE。YTz-PhC6器件具有更短的电荷提取时间(0.42  $\mu\text{s}$ )和更长的载流子寿命(0.95 ms)，有利于实现高效电荷收集与低复合损失。YTz-PhC6器件在 $J_{\text{SC}}$ (26.31  $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ )和FF(71.07%)方面表现优异，这主要归因于其更优化的形貌、更高的结晶度以及更平衡的载流子迁移率( $\mu_{\text{h}}/\mu_{\text{e}} \approx 1.05$ )。本研究凸显了侧链结构重要性，为设计高性能苯并三氮唑类非富勒烯受体提供了新的思路。

### REFERENCES

- Zhou, L. Y.; Yu, H.; Zhang, J. Y.; Qiu, D. D.; Fu, Y. A.; Yi, J. C.; Xie, L.; Li, X. J.; Meng, L.; Zhang, J. Q.; Lu, X. H.; Wei, Z. X.; Li, Y. F.; Yan, H. Tailoring the position of ester group on N-alkyl chains of benzotriazole-based small molecule acceptors for high-performance organic solar cells. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63(11), e202319635.

- 2 Li, X. M.; Duan, X. P.; Qiao, J. W.; Li, S. L.; Cai, Y. H.; Zhang, J. Q.; Zhang, Y.; Hao, X. T.; Sun, Y. M. Benzotriazole-based polymer acceptor for high-efficiency all-polymer solar cells with high photocurrent and low voltage loss. *Adv. Energy Mater.*, **2023**, 13(1), 2203044.
- 3 Wu, H. T.; Zhang, W. Z.; Xiang, K.; Li, Y. R.; Chen, J. H.; Bai, H. R.; Wang, X. C.; Xiao, M. J.; Su, N.; Yang, R. Q.; Jiang, L.; Fan, Q. P. Triptycene-derived 3D-architected non-fullerene acceptor with high luminescence enables 20.26% efficiency organic solar cells. *Angew. Chem.*, **2026**, 138(5), e22982.
- 4 Li, M. F.; Xu, Y.; Zhao, W. C.; Jia, L. F.; Wang, G. L.; Xie, Z.; Huang, D. S.; Gong, W. Q.; Ju, T. Y.; Chen, Z. H.; Cui, Y.; Hao, X. T.; Hou, J. H.; Yao, H. F. A multifunctional 2D-conjugated BDT polymer interlayer enables over 20% organic solar cells. *Adv. Mater.*, **2026**, 38(5), e17145.
- 5 Li, C. Q.; Cai, Y. H.; Hu, P. F.; Liu, T.; Zhu, L.; Zeng, R.; Han, F.; Zhang, M.; Zhang, M.; Lv, J. K.; Ma, Y. X.; Han, D. X.; Zhang, M.; Lin, Q. J.; Xu, J. W.; Yu, N.; Qiao, J. W.; Wang, J. R.; Zhang, X.; Xia, J. L.; Tang, Z.; Ye, L.; Li, X. Y.; Xu, Z. H.; Hao, X. T.; Peng, Q.; Liu, F.; Guo, L.; Huang, H. Organic solar cells with 21% efficiency enabled by a hybrid interfacial layer with dual-component synergy. *Nat. Mater.*, **2025**, 24(10), 1626–1634.
- 6 Wang, J. Q.; Li, J. Y.; Wang, Y. F.; Ren, J. Z.; Bi, P. Q.; Li, H. X.; Dai, J. B.; Zhang, S. Q.; Hou, J. H. Tandem organic solar cells with 21.5% efficiency. *Adv. Mater.*, **2025**, 37(43), e10378.
- 7 Mou, H. Y.; Yin, Y.; Chen, H. Y.; Xu, J. C.; Ding, J. Y.; Ju, C.; Zhu, J.; Wang, Y. Y.; Chen, W. J.; Xu, G. Y.; Zhang, T. J.; Li, J.; Li, Y. W.; Li, Y. F. Transient dipole strategy boosts highly oriented self-assembled monolayers for organic solar cells approaching 21% efficiency. *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147(24), 21241–21251.
- 8 Wang, Y. X.; Wen, J. J.; Zhong, Y. Y.; Fu, L. L.; You, Z. H.; Li, H. T.; Han, G. X.; Han, W. T.; Liu, J. C.; Zhang, H. X.; Feng, Y. S.; Li, H.; Liu, W. X.; Zhang, J. B.; Han, K.; Liu, Y. Homology-guided zwitterionic interlayers for 21% efficiency non-fullerene organic solar cells. *Adv. Mater.*, **2026**, 38(10), e20669.
- 9 Increasing the efficiency of binary organic solar cells through a two-step crystallization process. *Nat. Energy*, **2025**, 10(10), 1195–1196.
- 10 Wang, L.; Chen, C.; Gan, Z. R.; Cheng, J. C.; Sun, Y. D.; Zhou, J.; Xia, W. Y.; Liu, D.; Li, W.; Wang, T. Diluted ternary heterojunctions to suppress charge recombination for organic solar cells with 21% efficiency. *Adv. Mater.*, **2025**, 37(13), 2419923.
- 11 Luo, M.; Chen, Y. C.; Liang, J. H.; Zhou, J. D.; Yuan, D.; Zhang, Z. S.; Liu, X. C.; Zhang, L. J.; Xie, Z. Q.; Chen, J. W. Three isomeric non-fullerene acceptors comprising a mono-brominated end-group for efficient organic solar cells. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14(31), 35985–35996.
- 12 Deng, M.; Xu, X. P.; Duan, Y. W.; Qiu, W. K.; Yu, L. Y.; Li, R. P.; Peng, Q. 19.32% efficiency polymer solar cells enabled by fine-tuning stacking modes of Y-type molecule acceptors: synergistic bromine and fluorine substitution of the end groups. *Adv. Mater.*, **2024**, 36(11), 2308216.
- 13 Chai, G. D.; Chang, Y.; Zhang, J. Q.; Xu, X. P.; Yu, L. Y.; Zou, X. H.; Li, X. J.; Chen, Y. Z.; Luo, S. W.; Liu, B. B.; Bai, F. J.; Luo, Z. H.; Yu, H.; Liang, J. E.; Liu, T.; Wong, K. S.; Zhou, H.; Peng, Q.; Yan, H. Fine-tuning of side-chain orientations on nonfullerene acceptors enables organic solar cells with 17.7% efficiency. *Energy Environ. Sci.*, **2021**, 14(6), 3469–3479.
- 14 Yuan, J.; Zhang, Y. Q.; Zhou, L. Y.; Zhang, G. C.; Yip, H. L.; Lau, T. K.; Lu, X. H.; Zhu, C.; Peng, H. J.; Johnson, P. A.; Leclerc, M.; Cao, Y.; Ulanski, J.; Li, Y. F.; Zou, Y. P. Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core. *Joule*, **2019**, 3(4), 1140–1151.
- 15 Fan, B. B.; Zhang, D. F.; Li, M. J.; Zhong, W. K.; Zeng, Z.; Ying, L.; Huang, F.; Cao, Y. Achieving over 16% efficiency for single-junction organic solar cells. *Sci. China Chem.*, **2019**, 62(6), 746–752.
- 16 Yuan, J.; Zhang, H. T.; Zhang, R.; Wang, Y. M.; Hou, J. H.; Leclerc, M.; Zhan, X. W.; Huang, F.; Gao, F.; Zou, Y. P.; Li, Y. F. Reducing voltage losses in the A-DA'D-a acceptor-based organic solar cells. *Chem*, **2020**, 6(9), 2147–2161.
- 17 Xie, Y.; Huang, F. J.; Zheng, X. M.; Liu, Y. H.; Ran, G. L.; Zhang, W. K. Ultrafast carrier dynamics of nonfullerene acceptors with different exciton-phonon coupling: impact of intramolecular noncovalent interactions. *J. Phys. Chem. Lett.*, **2026**, acs.jpcclett.5c03344.
- 18 Lei, Y. T.; Meng, X. Y.; Guo, Q.; Sun, X. N.; Zhou, E. J. Recently progress of aromatic side chain engineering on Y6 for high performance organic solar cells. *Nano Res.*, **2025**, 18(10), 94907513.
- 19 Dong, J. W.; Li, Y. F.; Liao, C. T.; Xu, X. P.; Yu, L. Y.; Li, R. P.; Peng, Q. Dielectric constant engineering of nonfullerene acceptors enables a record fill factor of 83.58% and a high efficiency of 20.80% in organic solar cells. *Energy Environ. Sci.*, **2025**, 18(10), 4982–4995.

- 20 Jeong, S.; Sun, Z.; Cho, Y.; Yang, S. J.; Le Huyen Mai, T.; Yang, C. 3D conjugated nonflat biphenyl side chains: their exclusive role in inducing negative electrostatic potential in efficient organic solar cells. *Small*, **2025**, 21(41), e09667.
- 21 Zhou, J. L.; He, Z. H.; Sun, Y. M.; Tang, A. L.; Guo, Q.; Zhou, E. J. Organic photovoltaic cells based on nonhalogenated polymer donors and nonhalogenated A-DA'D-A-type nonfullerene acceptors with high VOC and low nonradiative voltage loss. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2022**, 14(36), 41296–41303.
- 22 Meng, D.; Zheng, R.; Zhao, Y. P.; Zhang, E.; Dou, L. T.; Yang, Y. Near-infrared materials: the turning point of organic photovoltaics. *Adv. Mater.*, **2022**, 34(10), 2107330.
- 23 Wang, T.; Sun, R.; Shi, M. M.; Pan, F.; Hu, Z. C.; Huang, F.; Li, Y. F.; Min, J. Solution-processed polymer solar cells with over 17% efficiency enabled by an iridium complexation approach. *Adv. Energy Mater.*, **2020**, 10(22), 2000590.
- 24 Hu, D. Q.; Tang, H.; Chen, C.; Huang, P. H.; Shen, Z. B.; Li, H. X.; Liu, H.; Petoukhoff, C. E.; Jurado, J. P.; Luo, Y.; Xia, H.; Fong, P. W. K.; Fu, J. H.; Zhao, L. Y.; Yan, C. Q.; Chen, Y.; Cheng, P.; Lu, X. H.; Li, G.; Laquai, F.; Xiao, Z. Y. Insights into preaggregation control of Y-series nonfullerene acceptors in liquid state for highly efficient binary organic solar cells. *Adv. Mater.*, **2024**, 36(30), 2402833.
- 25 Kim, D.; Lee, S.; Oh, C. M.; Hwang, I. W.; Yoon, C.; Kim, H.; Byeon, J.; Lee, K.; Hong, S. Bifunctional urea-polyethyleneimine-mediated surface engineering in SnO<sub>2</sub> electron-transport layer for efficient and stable organic solar cells. *Sol. RRL*, **2024**, 8(7), 2300987.
- 26 Wu, X.; Li, Y. H.; Wang, Y. F.; Zhang, M. P.; Zhu, Q.; Huang, X.; Li, B. L.; Xue, Y. Y.; Qing, J.; Cai, W. Z. Enhancing efficiency and stability in organic photovoltaics through miscibility of high-*T<sub>g</sub>* insulating material with Y-series nonfullerene acceptors. *Sol. RRL*, **2024**, 8(4), 2300812.
- 27 Du, X. Y.; Yuan, Y.; Zhou, L.; Lin, H.; Zheng, C. J.; Luo, J. Y.; Chen, Z. H.; Tao, S. L.; Liao, L. S. Delayed fluorescence emitter enables near 17% efficiency ternary organic solar cells with enhanced storage stability and reduced recombination energy loss. *Adv. Funct. Mater.*, **2020**, 30(15), 1909837.
- 28 Yang, Y. N.; Li, X. M.; Wang, S. J.; Duan, X. P.; Cai, Y. H.; Sun, X. B.; Wei, D. H.; Ma, W.; Sun, Y. M. An organic small molecule as a solid additive in non-fullerene organic solar cells with improved efficiency and operational stability. *Chin. J. Polym. Sci.*, **2023**, 41(2), 194–201.
- 29 Hu, D. Q.; Tang, H.; Fu, J. H.; Li, Y. H.; Liu, L.; Huang, P. H.; Lv, J.; Zheng, D. M.; He, Y. K.; Liu, H.; Xu, B. M.; Hu, Z.; Lu, X. H.; Xiao, Z. Y.; Li, G.; Yang, Y. M.; Laquai, F.; Brabec, C. J.; Lee, D. J.; Hsu, H. Y. Self-assembly control of Y-series non-fullerene acceptors for sustainable and scalable organic photovoltaics. *Nanomicro Lett.*, **2026**, 18(1), 182.
- 30 Liu, J. F.; Wang, Z. Y.; Zhang, D.; Gao, X.; Yang, L. P.; Wang, Z.; Gao, Y. R.; Shao, M. A universal hydrogen bond strategy enable highly efficient, mechanically robust, and thermally stable organic solar cells. *Adv. Funct. Mater.*, **2025**, 35(51), e12915.
- 31 Xie, Y. P.; Ye, L. L.; Cai, Y. H.; Zhang, X.; Xu, J. Q.; Wang, T.; Liu, F.; Sun, Y. M. Fine-tuning aggregation of nonfullerene acceptor enables high-efficiency organic solar cells. *Small Struct.*, **2021**, 2(9), 2100055.
- 32 Sewak, R.; Singh, K.; Mondal, A. Decoding morphological control in isomeric non-fullerene acceptor-polymer blends for organic solar cells. *ACS Appl. Energy Mater.*, **2025**, 8(15), 11456–11467.
- 33 Yang, S. Q.; Zhang, H.; Zhang, J. Q.; Wei, Z. X. Stacking matters—a spectroscopic overview from SMAs to PSMA in organic solar cells. *Adv. Energy Mater.*, **2025**, 15(42), e02968.
- 34 Wang, H.; Liu, T.; Zhou, J. D.; Mo, D. Z.; Han, L.; Lai, H. J.; Chen, H.; Zheng, N.; Zhu, Y. L.; Xie, Z. Q.; He, F. Bromination: an alternative strategy for non-fullerene small molecule acceptors. *Adv. Sci.*, **2020**, 7(9), 1903784.
- 35 Khlaifia, D.; Chemek, M.; Salwa, A. S.; Alimi, K. Epoch-making design strategies for high-efficiency fused-ring A-DA'D-a type non-fullerene acceptors in organic solar cells. *Macromol. Rapid Commun.*, **2025**, 47(5), e00691.
- 36 Zhang, G. J.; Wu, Q. X.; Duan, Y. W.; Liu, W. Q.; Jeong, S. Y.; Woo, H. Y.; Zhao, Q. M.; Zhou, H. Achieving 19.4% efficiency polymer solar cells by reducing backbone disorder in donor terpolymers. *Adv. Funct. Mater.*, **2024**, 34(48), 2408678.
- 37 Liu, S.; Yuan, J.; Deng, W. Y.; Luo, M.; Xie, Y.; Liang, Q. B.; Zou, Y. P.; He, Z. C.; Wu, H. B.; Cao, Y. High-efficiency organic solar cells with low non-radiative recombination loss and low energetic disorder. *Nat. Photonics*, **2020**, 14(5), 300–305.
- 38 Hong, L.; Yao, H. F.; Wu, Z. A.; Cui, Y.; Zhang, T.; Xu, Y.; Yu, R. N.; Liao, Q.; Gao, B. W.; Xian, K. H.; Woo, H. Y.; Ge, Z. Y.; Hou, J. H. Eco-compatible solvent-processed organic photovoltaic cells with over 16% efficiency. *Adv. Mater.*, **2019**, 31(39), 1903441.
- 39 Jiang, K.; Wei, Q. Y.; Lai, J. Y. L.; Peng, Z. X.; Kim, H. K.; Yuan, J.; Ye, L.; Ade, H.; Zou, Y. P.; Yan, H. Alkyl chain tuning of small molecule acceptors for efficient organic solar cells. *Joule*, **2019**, 3(12), 3020–3033.

- 40 Cui, Y.; Yao, H. F.; Zhang, J. Q.; Zhang, T.; Wang, Y. M.; Hong, L.; Xian, K. H.; Xu, B. W.; Zhang, S. Q.; Peng, J.; Wei, Z. X.; Gao, F.; Hou, J. H. Over 16% efficiency organic photovoltaic cells enabled by a chlorinated acceptor with increased open-circuit voltages. *Nat. Commun.*, **2019**, 10(1), 2515.
- 41 Chen, Z. H.; Zhang, S. Q.; Zhang, T.; Ren, J. Z.; Dai, J. B.; Li, H. X.; Qiao, J. W.; Hao, X. T.; Hou, J. H. Iodinated electron acceptor with significantly extended exciton diffusion length for efficient organic photovoltaic cells. *Angew. Chem.*, **2024**, 136(9), e202317892.
- 42 Liu, W.; Xu, X.; Yuan, J.; Leclerc, M.; Zou, Y. P.; Li, Y. F. Low-bandgap non-fullerene acceptors enabling high-performance organic solar cells. *ACS Energy Lett.*, **2021**, 6(2), 598–608.
- 43 Li, Z.; Zhu, C.; Yuan, J.; Zhou, L. Y.; Liu, W.; Xia, X. X.; Hong, J.; Chen, H. G.; Wei, Q. Y.; Lu, X. H.; Li, Y. F.; Zou, Y. P. Optimizing side chains on different nitrogen aromatic rings achieving 17% efficiency for organic photovoltaics. *J. Energy Chem.*, **2022**, 65, 173–178.
- 44 Fu, H. T.; Li, Y. X.; Yu, J. W.; Wu, Z. A.; Fan, Q. P.; Lin, F.; Woo, H. Y.; Gao, F.; Zhu, Z. L.; Jen, A. K. Y. High efficiency (15.8%) all-polymer solar cells enabled by a regioregular narrow bandgap polymer acceptor. *J. Am. Chem. Soc.*, **2021**, 143(7), 2665–2670.
- 45 Jia, J. C.; Jing, J. H.; Jia, T.; Zhang, K.; Zhang, J.; Zhang, J. B.; Huang, F.; Yang, C. L. The regioisomeric bromination effects of fused-ring electron acceptors: modulation of the optoelectronic property and miscibility endowing the polymer solar cells with 15% efficiency. *J. Mater. Chem. A*, **2020**, 8(47), 25101–25108.
- 46 李骁骏, 李永舫. 共轭聚合物和共轭有机分子电子能级的测量. *高分子学报*, **2022**, 53(8), 995–1004.
- 47 Jing, J. H.; Dong, S.; Zhang, K.; Xie, B. M.; Zhang, J. B.; Song, Y.; Huang, F. *In-situ* self-organized anode interlayer enables organic solar cells with simultaneously simplified processing and greatly improved efficiency to 17.8%. *Nano Energy*, **2022**, 93, 106814.
- 48 Wu, Z. H.; Sun, C.; Dong, S.; Jiang, X. F.; Wu, S. P.; Wu, H. B.; Yip, H. L.; Huang, F.; Cao, Y. N-type water/alcohol-soluble naphthalene diimide-based conjugated polymers for high-performance polymer solar cells. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138(6), 2004–2013.

## Research Article

## Side Chain Engineering of Benzotriazole-based Non-fullerene Acceptors for Tuning Structure and Photovoltaic Properties

Ge-jing Wang<sup>1</sup>, Long-zhen You<sup>1\*</sup>, Zheng-qi Liu<sup>2</sup>, Ru-xue Ding<sup>2</sup>, Xu-bing Bai<sup>2</sup>, Xiao-ming Li<sup>3</sup>, Yun-hao Cai<sup>2\*</sup>

<sup>(1)</sup>School of Materials Science and Engineering, Linyi University, Linyi 276000

<sup>(2)</sup>School of Materials Science and Optoelectronic Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049

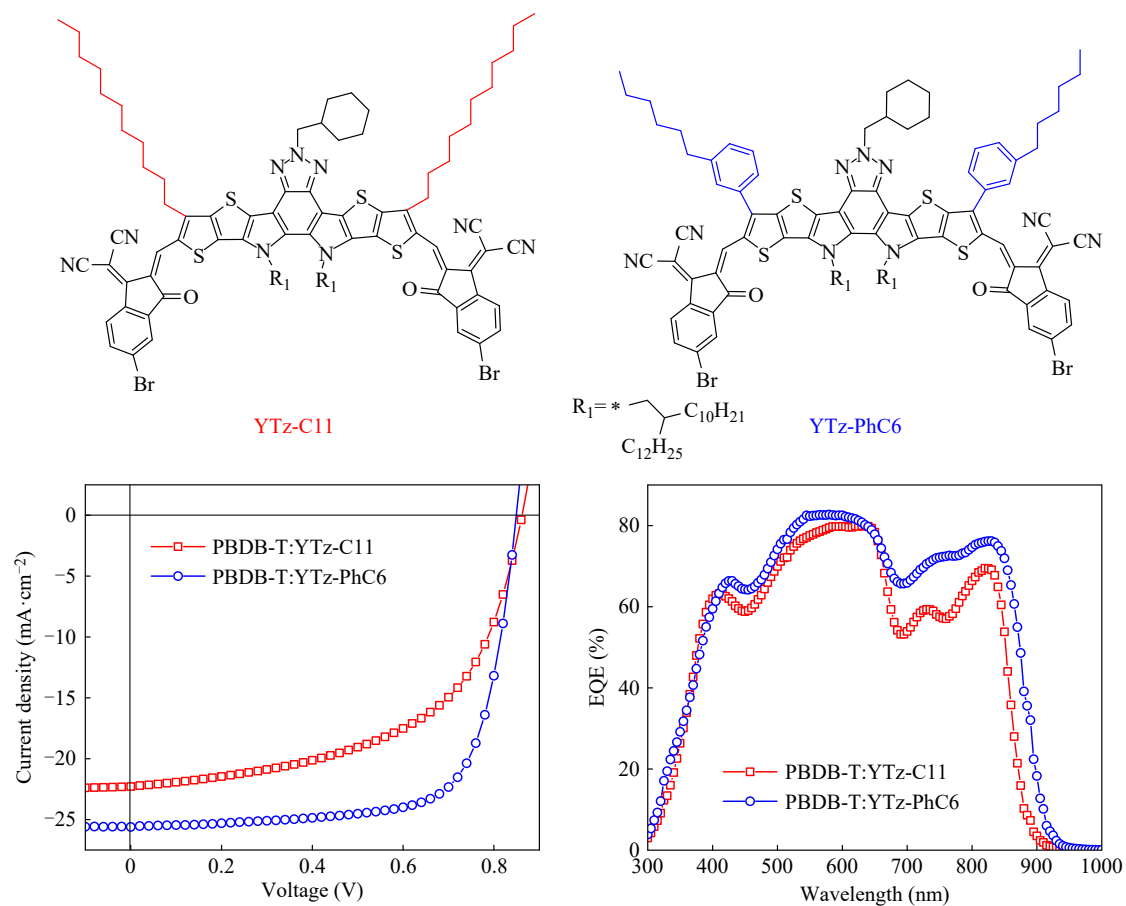
<sup>(3)</sup>College of Textiles and Clothing, Qingdao University, Qingdao 266071

**Abstract** Two novel benzotriazole-based non-fullerene acceptors, YTz-C11 and YTz-PhC6, were designed and synthesized to systematically investigate the effects of replacing the linear functional group (*n*-undecyl) at the  $\beta$ -position of the thienothiophene unit with a two-dimensional functional group (3-hexylphenyl) on their molecular structure, physicochemical properties, thin-film morphology, and photovoltaic performance. Theoretical calculations demonstrated that the introduction of the benzene ring in YTz-PhC6 leads to a significant increase (approximately 7.8°–8.3°) in the dihedral angle between the IC terminal group and the molecular backbone, thereby optimizing the molecular packing behavior. Spectroscopic and electrochemical tests revealed that YTz-PhC6 exhibits a narrower optical bandgap (1.37 eV) and a lower LUMO energy level (–3.82 eV). Organic solar cells based on PBDB-T:YTz-PhC6 achieved a power conversion efficiency (PCE) of 15.87%, significantly higher than that of devices based on YTz-C11 (10.67%). The superior performance was primarily attributed to faster charge transport, more balanced charge carrier mobility ( $\mu_h/\mu_e \approx 1.05$ ), and optimized nanoscale phase-separated morphology.

\* Corresponding authors: Long-zhen You, E-mail: youlongzhen@lyu.edu.cn

Yun-hao Cai, E-mail: caiyuhao@ucas.ac.cn

Furthermore, transient optoelectronic tests indicated that YTz-PhC6 devices exhibit shorter charge extraction time (0.42  $\mu\text{s}$ ) and longer carrier lifetime (0.95 ms). This study demonstrates that introducing a two-dimensional side chain at the  $\beta$ -position of non-fullerene acceptors can effectively regulate their molecular packing and optoelectronic properties, providing new insights for the material design of high-performance organic solar cells.



**Keywords** Organic solar cells; Non-fullerene acceptors; Benzotriazole; Side chain engineering