

國科會專題研究計畫成果報告撰寫格式

99年5月5日本會第304次學術會報修正通過

一、說明

國科會基於學術公開之立場，鼓勵一般專題研究計畫主持人發表其研究成果，但主持人對於研究成果之內容應負完全責任。計畫內容及研究成果如涉及專利或其他智慧財產權、違異現行醫藥衛生規範、影響公序良俗或政治社會安定等顧慮者，應事先通知國科會不宜將所繳交之成果報告蒐錄於學門成果報告彙編或公開查詢，以免造成無謂之困擾。另外，各學門在製作成果報告彙編時，將直接使用主持人提供的成果報告，因此主持人在繳交報告之前，應對內容詳細校對，以確定其正確性。

本格式說明之目的為統一成果報告之格式，精簡報告內容之篇幅以4至10頁為原則，完整報告內容之篇幅不得少於10頁。

成果報告繳交之期限及種類(精簡報告、完整報告、期中精簡報告、期中完整報告等)，應依本會補助專題研究計畫作業要點及專題研究計畫經費核定清單之規定辦理。

二、報告格式：依序為封面、目錄(精簡報告得省略)、中英文摘要及關鍵詞、報告內容、參考文獻、計畫成果自評、可供推廣之研發成果資料表、附錄。

(一)報告封面：請至本會網站(<http://www.nsc.gov.tw>)線上製作(格式如附件一)。

(二)中、英文摘要及關鍵詞(keywords)。

(三)報告內容：包括前言、研究目的、文獻探討、研究方法、結果與討論(含結論與建議)……等。

(四)計畫成果自評部分：請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值(簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性)、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估，並請至本會網站線上製作。(格式如附件二)

(五)頁碼編寫：請對摘要及目錄部分用羅馬字I、II、III……標在每頁下方中央；報告內容至附錄部分請以阿拉伯數字1.2.3……順序標在每頁下方中央。

(六)附表及附圖可列在文中或參考文獻之後，各表、圖請說明內容。

(七)可供推廣之研發成果資料表：

1.研究計畫所產生之研發成果，應至國科會科技研發成果資訊系統(STRIKE系統，<https://nscnt66.nsc.gov.tw/strike/>)填列研發成果資料表(如附件三)，循執行機構行政程序，由研發成果推廣單位(如技轉中心)線上繳交送出。

2.每項研發成果填寫一份。

(八)若該計畫已有論文發表者(須於論文致謝部分註明補助計畫編號)，得作為成果報告內容或附錄，並請註明發表刊物名稱、卷期及出版日期。若有與執行本計畫相關之著作、專利、技術報告、或學生畢業論文等，請在參考文獻內註明之。

三、計畫中獲補助國外或大陸地區差旅費、出席國際學術會議差旅費或國際合作研究計畫差旅費者，須依規定分別撰寫心得報告，並至本會網站線上繳交電子檔，心得報告格式如附件四、五、六。

四、報告編排注意事項

(一)版面設定：A4紙，即長29.7公分，寬21公分。

(二)格式：中文打字規格為每行繕打(行間不另留間距)，英文打字規格為Single Space。

(三)字體：以中英文撰寫均可。英文使用Times New Roman Font，中文使用標楷體，字體大小以12號為主。

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 成果報告
 期中進度報告

近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料

High Sensitivity conjugated polymer/ nanoparticle Nanocomposite for Near IR
Sensor Applications

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC 97-2221-E-009-006-MY3

執行期間：98年8月1日至99年7月31日

執行機構及系所：交通大學材料科學與工程學系

計畫主持人：韋光華

共同主持人：

計畫參與人員：韋光華、郭芝吟、蘇明鑫、林惠妮、許毓倩

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本計畫除繳交成果報告外，另須繳交以下出國心得報告：

- 赴國外出差或研習心得報告
- 赴大陸地區出差或研習心得報告
- 出席國際學術會議心得報告
- 國際合作研究計畫國外研究報告

處理方式：除列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

中 華 民 國 99 年 7 月 29 日

Part 1.

探討 PEDOT:PSS 電洞傳輸層對 PbSe 量子點多層膜光伏特元件之影響。藉由穿透式電子顯微鏡與 X-ray reflectivity 量測得知，添加 PEDOT:PSS 可使 PbSe 量子點多層膜光伏特元件表面型態較為平滑。此外，經由光伏特元件之電流-電壓特性曲線量測發現，隨著 PbSe 量子點第一激發吸收波長的增加，粒徑變大，元件之開放電壓有變小的趨勢，而添加 PEDOT:PSS 使得 PbSe 薄膜元件的開放電壓有增加的現象，且太陽能元件轉換效率從 1.5% 提升至 2.4%，比沒有添加 PEDOT:PSS 之元件增加了 60%。根據量測外部量子效率，得知此元件在可見光與紅外光區皆有光電流響應。在元件穩定性方面，分別持續照射模擬太陽光數百分鐘，當效率衰減至原先之 80% 時，添加 PEDOT:PSS 之元件所經歷的時間為沒有 PEDOT:PSS 之元件的六倍，得知 PEDOT:PSS 可使得 PbSe 量子點多層膜光伏特元件維持長時間的元件壽命。

A thin poly(3,4-ethylenedioxythiophene):poly(styrene sulfonate) (PEDOT:PSS) hole transport layer enhances the AM1.5 power conversion efficiency of a PbSe quantum dot (QD)-containing photovoltaic device to 2.4%, from 1.5% for a standard PbSe QD device, a relative increase of 60%. Synchrotron X-ray reflectivity measurements revealed that the roughness of the interfaces between the various layers decreased dramatically in the presence of the PEDOT:PSS layer. In addition, the device life time under continuous simulated AM1.5 irradiation (100 mW cm^{-2}), measured in terms of the time required to reach 80% of the normalized efficiency, for the PbSe QD device incorporating the PEDOT:PSS hole transport layer was six times longer than that of the standard PbSe QD device.

Part 2.

我們準備了薄膜的 PbSe 量子點，具有三種不同的配體，油酸 (OA)，丁胺 (BA) 和 1,2-ethanedithiol (EDT)，明顯的影響在薄膜中 PbSe 量子點的排列和光電特性。穿透式電子顯微鏡顯示，在薄膜中局部地區的小面積 (300x300nm)，配體改變了量子點間距，引起在 PbSe 量子點顯著變化：從油酸包覆 (OA-capped) PbSe 量子點的超晶格到一個混亂的 1,2 乙基二硫醇包覆 (EDT-capped) PbSe 量子點的圖案。使用同步輻射 X 射線反射偵測和數據擬合，我們確定的粗糙度降低，對大面積 (1.5x1.5cm) 的 PbSe 量子點薄膜包覆在 BA 和 EDT 上的平均密度增加了，相對於那些被 OA 包覆的 PbSe 量子點薄膜。尤其是 PbSe 量子點垂直的堆疊密度，這對於電荷的傳輸非常重要，對系統含有 EDT 配體大大提高了。因此，元件含有 EDT 處理的 PbSe 量子點薄膜作為主動層顯示大大改善能量轉換效率 (PCES)，相對於那些對應的元件以 OA 或者 BA 包覆的 PbSe 量子點薄膜作為主動層。採用層層堆疊技術，我們製造 EDT 包覆 PbSe 量子點元件，顯示 2.45% 的能量轉換效率。

We have prepared thin films of PbSe quantum dots (QDs) featuring three different ligands, oleic acid (OA), butylamine (BA), and 1,2-ethanedithiol (EDT), which have pronounced affects on the arrangement and photovoltaic performance of the PbSe QDs in the thin films. Transmission electron microscopy revealed that ligands that altered the inter-QD spacing induced significant changes in the packing of the PbSe QDs in localized regions of small areas (300 x 300 nm) of the thin films: from a superlattice of OA-capped PbSe QDs to a chaotic pattern of EDT-capped PbSe QDs. Using a synchrotron X-ray reflectivity probe and data fitting,

we determined that the roughness decreased and the average densities increased for large-area (1.5 x 1.5 cm) PbSe QD thin films capped with BA and EDT, relative to those of the OA-capped PbSe QD film. In particular, the PbSe QDs' vertical packing density, which is critical for charge transport, increased substantially for the system incorporating EDT ligands. As a result, devices containing the EDT-treated PbSe QD film as the active layer displayed much improved power conversion efficiencies (PCEs) relative to those of corresponding devices featuring either the OA- or BA-capped PbSe QD films as active layers. Adopting a layer-by-layer technique, we fabricated a EDT-capped PbSe QD device that exhibited a PCE of 2.45%.

關鍵詞: 硒化鉛量子點、光伏元件、電洞傳輸層、PEDOT:PSS、X光反射

keywords : PbSe quantum dots, photovoltaic device, hole transport layer, PEDOT:PSS, X-ray reflectivity

1. 前言/文獻探討

Part 1.

太陽能電池元件製造使用溶液處理加工材料有很多潛在的好處，特別是快速，可撓的節約在製備大面積的元件。有機聚合物的溶液處理，^[1,2]無機導體，^[3-5]和有機/無機混合^[6-9]已被廣泛採用。舉個例子是使用共軛聚合物在製備異質太陽能元件，得到了太陽能轉換效率大於7%。^[10]然而，由於複合材料的低帶隙共軛聚合物和富勒烯衍生物保持活躍只在波長300到800 nm，他們未能收穫最多的輻射在紅外（IR）光譜區域。憑藉量子尺寸效應，鉛鹽類的膠體量子點有吸收的特性，可以調整整個紅外光譜。^[11-13]此外，膠體鉛鹽量子點有可能發生多激子產生，^[14,15]產生一個以上的電子/電洞對。如果多激子的形成，解離，和電荷收集全部都是有效事件，由此產生的光電流增強，將會導致太陽能轉換效率增加。^[16]因此，開發鉛鹽類膠體量子點在光電元件的使用最近的已成為一個活躍的研究領域。^[17-20]

使用層層堆疊（LBL）技術-一個可供選擇的

（一）量子點浸塗或旋塗到銦錫氧化物（ITO）基板

（二）揭露量子點薄膜到雙齒配體能夠有效地去除長，絕緣油酸作為配體的合成PbSe量子點，導致PbSe量子點薄膜電導率增加和傑出的光電特性。^[4-5,21]

第一個使用PbSe量子點以LBL處理的例子，形成雙層元件結構導致了AM1.5 能量轉換效率（PCE）為1.1%。^[22]後來，事實證明，PbSe量子點太陽能元件顯示優越性能在AM1.5能量轉換效率約2.1%。^[23]隨後，當結合 PbS_xSe_{1-x} 量子點可獲得大幅改善的開路電壓（ V_{OC} ）^[24]或PbSe量子點/ZnO異質結構^[25,26]造成具有高能量轉換效率。

因為一個完整的量子點主動層使用LBL技術溶液處理步驟可長達20個循環，主動層和電極介面之間的品質取決於基板電極表面，關鍵是良好的電荷傳輸發生在介面上以取得良好的元件特性。^[27]此外，調整兩者量子點的價帶和陽極金屬氧化物的功函數之間，會影響太陽能元件的 V_{OC} 。因此，元件的陽極和第一量子點層之間必然存在高品質介面。

Part 2.

共軛聚合物的溶液處理，^[1,34-36]有機小分子，^[37,38]和膠體量子點(QDs)^[3,6,39-43]潛在許多好處，尤其是快速和具有可撓及大面積光伏元件的成本效益準備。太陽能電池由聚合物製成的通常吸收波長可達800nm，即使最佳的單層太陽能電池的帶隙位於1100 nm的區域。^[44]實現對改善效率顯著的一個重要的方法，包含擴展元件的光譜靈敏度到近紅外波段，其中含有多達太陽能光譜能量的一半。這樣的系統可利用鉛鹽膠體QDs作為實現捕光材料，因為可憑藉一系列的量子尺寸調節到想要的光學帶隙。^[11,44-47]此外，膠體Pb-salt QDs有可能會產生多激子，^[14,15,48]產生超過一個電子/空穴對導致光電流的增加，進而增加AM1.5的能量轉換效率。

膠體Pb-salt QDs使用在太陽能電池已受到快速的發展，成為一研究特別活躍的領域。例如，一個PbS QD太陽能電池具有強烈的鍵結雙齒配體使不易起化學變化的PbS QDs透過溶液交換過程發展，AM1.5 G能量轉換效率呈現3.6%的。^[49]太陽能電池根據PbSe QD膜形成以LBL技術AM1.5 G呈現2.1-2.4%。^[23,50]太陽能電池根據高度密閉三元的 PbS_xSe_{1-x} QD在AM1.5 G下提供了PCE 3.3%。^[24]此外，當Pb-salt QDs與金屬氧化物（ TiO_2 和ZnO）異質結構結合，曾經有獲得在PCEs大幅的改善。^[25,26,51-53]

膠體QDs的表面一般具有長鏈的和電子絕緣的有機配體，對使用在光電元件應用必須縮短或移除。^[5,54]目前研究的主要挑戰在膠體QDs是設計方法對配體交換或化學處理對較短的分子去減少

QD間的間距，由此從而創造更多的導電QD薄膜。儘管一些研究已經在這個方向進行，^[55,56]例如-配體影響在QD薄膜複雜的結構，QD如何在不同的方向堆疊或粗糙度和他們堆疊的密度-從未探索。與QD薄膜的結構信息相關連，不僅對科學的興趣，而且也提供了了解對於QD薄膜作為光電元件中主動層的如何表現。例如，如果我們採用膠體QDs，必須克服的挑戰之一是在太陽能元件中整齊的QD薄膜是不良的電荷傳輸特性。合理實現這一目標需要深的理解QD薄膜的光學，結構和電子性質。

2. 研究目的

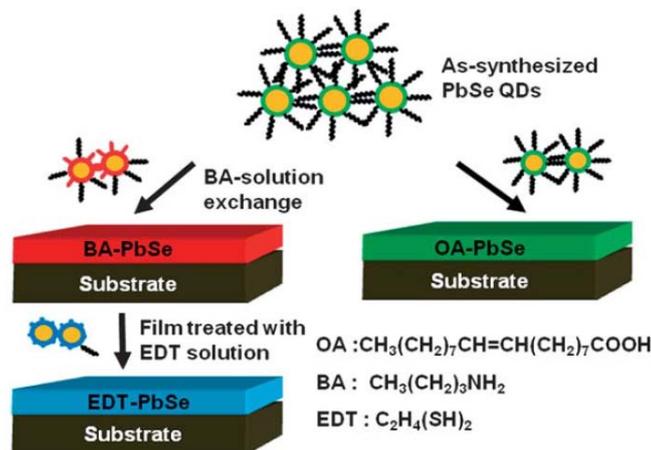
Part 1.

在這項研究中，我們提出了超薄（約 20nm）的PEDOT：PSS為電洞傳輸層界面介於的硒化鉛量子點主動層和ITO基板之間，用來改善界面平整度和調整波段，進而增強太陽能元件性能和使用壽命。這些元件的製造描述在實驗部分，元件結構由陽極ITO、陰極Al/Ca和主動層PbSe量子點，及分別有和沒有 PEDOT：PSS層組成。

Part 2.

在這項研究中，我們研究了三種不同的配體的影響，油酸(OA)，丁胺 (BA)和 1,2- ethanedithiol (EDT) - PbSe QD 薄膜明顯的影響在結構和光電性能。我們用傅立葉轉換紅外光譜 (FTIR)，透射電子顯微鏡 (TEM)，X 射線光電子能譜 (XPS) 和同步輻射掠入射 X 射線衍射 (GIXRD) 探討 PbSe QD 的薄膜包覆這些配體的結構；比較配體改變了量子點間距，引起在 PbSe 量子點顯著變化：觀察 PbSe 量子點的從超晶格到一個混亂的結構形貌。此外，我們測量了含有這些配體覆蓋的 PbSe QD 薄膜作為主動層的元件電流密度-電壓特性，並探討在太陽能元件效率上的效果。

我們首先合成在甲苯OA-capped的PbSe QD，利用離心沉澱。然後，我們添加無水BA進行在溶液中的PbSe QD的配位體交換，再利用離心獲得BA-PbSe QDs。將兩者OA -和BA - PbSe QDs溶在辛烷(octane)的懸浮液，接著旋塗於各種基材薄膜上作進一步鑑定。浸泡有BA -PbSe QD薄膜的基板於EDT溶液中短時間內為EDT-PbSe QD薄膜。圖解1描述了我們用來製備PbSe薄膜的過程。



圖解 1. PbSe 量子點含有不同配體長度的製備。

3. 研究方法

Part 1.

材料

-由 Alfa Aesar 購買

Lead(II) oxide (PbO, 99.99%)

-由 **Sigma-Aldrich** 購買

Selenium (Se, 99.9%), Oleic acid (OA, tech. 90%), Trioctylphosphine (TOP, tech. 90%), 1-octadecene (ODE, tech. 90%), Butylamine (BA, 99.5%), 1,2-ethanedithiol (EDT, 98%)

-由 **TEDIA** 購買

Octane (HPLC-grade), Acetonitrile (anhydrous)

-由 **J. T. Baker**購買

Methanol (anhydrous), toluene (anhydrous), and isopropanol (anhydrous)

PbSe 量子點：量子點是在氬環境的Schlenk系統下合成，在本篇期刊中，量子點是根據Yu等人^[31]研究團隊所發表過的方法來合成。在氬氣環境下把PbO(0.8920 g, 4.000 mmol), oleic acid (2.825 g, 10.00 mmol), 和ODE(12.83 g)一起加入於三頸瓶中攪拌均勻，並加熱至 160 度 30 分鐘，直至無色的澄清溶液。在此溫度下，把 10%的Se-TOP溶液(6.4 g)快速注入於澄清溶液中，溫度會下降，下降至大約 150°C時，粒子開始成長。當反應達 30~120 分鐘，把混合物溶液至入於水/冰浴中 1 分鐘，停止反應。膠狀的量子點可溶於甲苯中，以甲醇洗沉澱，反覆洗沉澱至膠狀的量子點與混合物溶液完全分離。最後抽乾，並除存於手套箱中。

Part 2.

材料

-由 **Sigma-Aldrich**購買

Lead(II) oxide (PbO, 99.9%), selenium (Se, 99.9%), OA (tech.90%), trioctylphosphine (TOP, tech. 90%), 1-octadecene (ODE, tech. 90%), and BA (99.5%)

-由 **Fluka**購買

EDT (>98%)

-由 **J. T. Baker**購買

Anhydrous octane, MeCN, MeOH, toluene, isopropanol, and tetrachloroethylene (TCE, 99.9%)

PbSe量子點^[31]

氧化鉛(II) (0.8920 g, 4.00 mmol)溶於含有OA (2.825 g, 10.00 mmol) 及ODE (12.83 g) 的混合溶液中，並置入三頸瓶中加熱至 165°C。在持續攪拌和Ar環境下，反應 45 分鐘，直到呈現無色的澄清溶液。之後，在此溫度下，把 10%的 Se-TOP 溶液(6.4g) 快速注入於無色溶液中，溫度會下降至大約 150°C並開始其成長過程。反應達至 45 分鐘後，4.5nm的膠狀量子點生成。再加入冰的甲苯以終止其反應。之後，膠狀量子點粒子溶於甲苯中，利用甲醇反覆洗沉澱來移去未被反應的附著基，以讓膠狀量子點粒子與成長混合溶液分離。

BA溶液的附著基取代法^[32]

以相同方法所合成的 PbSe 膠狀粒子，覆溶至去水的 BA 溶液，且在氬氣的手套箱中持續攪拌 48 小時。以 BA 為配位基的膠狀量子點粒子會再沉澱於異丙酮，烘乾，再覆溶於無水的辛烷(anhydrous) 中。

QD薄膜

所有過程皆在充滿N₂的手套箱中製作。PbSe膠體QD由octane (80 mg mL⁻¹)旋塗於各種基板上。

包括拋光 Si 基板，銻錫氧化物 (ITO)，和銅網固定在玻璃基板上。BA-交換的量子點薄膜，然後在 1 mM EDT 於乙腈 (MeCN) 浸泡幾秒鐘前先用無水乙腈沖洗，以除去殘留的獨立 EDT。

材料分析

衰減全反射傅立葉變換紅外光譜 (ATR-FTIR) 光譜記錄在室溫用 Perkin-Elmer Spectrum 100 光譜儀的溫度。光吸收利用獲得的數據，日立 U-4100 分光光度計帶積分球裝備。XPS 是用熱進行 350 V 科學儀器，單色的 Mg K α 輻射，和 29 eV 的能量傳遞。TEM 影像記錄使用 FEI Spirit TWIN 儀器在 120 keV 操作。表面正常的廣角 X 射線散射 (WAXS) 和 in-plane GIXRD 測量執行在高解析量扭擺磁鐵的光束線 BL-17B1，利用台灣新竹的國家同步八圓衍射儀輻射研究中心 (NSRRC)。對於 GIXRD 和 WAXS 分析，光子能量為 8 keV 的助溶劑估計為 10^{11} 光子 s^{-1} 。在這個實驗使用兩個雙縫之間的樣品和探測器提供了在垂直散射面約 0.001 nm^{-1} 的一個典型波向量分辨率。

元件製備和特性

ITO 玻璃基板上的圖案 ($5 \Omega \text{ sq}^{-1}$ ，默克公司) 是用清潔劑清洗，甲醇，丙酮，異丙醇，經過連續的超聲波處理，然後在氮氣下乾燥。PEDOT:PSS (Baytron P VP AI4083)，然後旋塗在紫外臭氧處理過後的 ITO 上；樣品在 150°C 1 小時下退火前被轉移到 N₂ 填充手套箱內。對於 OA-包覆和 BA-交換的 PbSe QD 元件，量子點在 octane 旋塗在事前沉積的 ITO 電極上 PEDOT:PSS 層。對於 EDT 處理量子點，BA-交換 QD 薄膜在 ITO 電極浸泡在 1 mM EDT 5 秒。此外，利用 LBL 技術，BA-交換 QD 溶液 (50 mg mL^{-1}) 旋塗 PEDOT:PSS/ITO 基板，然後將整個試片用 1 mM 的 EDT 處理，用無水的乙腈和辛烷清洗，並在氮氣下吹乾，這些步驟重複四次。使用 Veeco Dektak 輪廓儀量測，所有的主動層是典型的 $120 \pm 20 \text{ nm}$ 米厚。最後，所有的樣品在約 10^{-7} torr 通過遮罩遮蔽熱蒸鍍 20 nm Ca 和 100 nm Al 沉積上部電極。每個基板上製作 4 個元件，每一個有效面積為 0.04 cm^2 。

PbSe QD 元件的電流密度-電壓特性件電流密度進行測量，這些元件通過一個遮罩適當的電極橫越面積下，使用模擬 AM1.5 (100 mW cm^{-2}) 照射 Xe 燈放大器 Newport 66902 150W 太陽光模擬器搭配 Keithley 2400 電源量測單元。對於太陽能電池的測量，太陽模擬器的光譜校準如下：^[58] 光伏測量 (PVM-154) 單矽太陽能電池 (NREL 校準) 和一矽光電二極體 (Hamamatsu S1133) 用來檢查曝光面積 (100 mW cm^{-2}) 的照射。一個錯位因子 ($M=1.34$) 的獲得是使用 PVM-154 為參考元件和製造的元件當測試元件，並記錄光譜以每 10 nm 的間隔從 300 nm 至 900 nm。PVM-154 元件與 KG-5 過濾片 (350-700 nm 通過, Newport) 結合，去模擬一參考太陽能電池光譜反應從 350 nm 到 700 nm。校正是根據 IEC-69094-1 頻譜。外部量子效率 (EQE) 數據記錄由 Optosolar SPF50 的頻譜回應。Si 參考元件是用來校準光的波長從 300 至 1060 nm；Ge 參考元件，從 1060 到 1800 nm。

4. 結果與討論

Part 1.

Fig. 1 顯示一元件電流密度和電壓特性包含了 PbSe 量子點直徑 4.5 nm 厚度 95 nm 層於 AM1.5G 情況下 (100 mW cm^{-2} , 25°C) 和在黑暗中。元件的暗電流曲線顯示了導通電壓的約 0.1 V。對元件的能量轉換含有 20 nm 厚的 PEDOT:PSS 層為 2.4%，高於標準元件 1.5%。元件結合了 PEDOT:PSS 層增加了 60% 的能量轉換效率，相對於標準元件增加了開路電壓 (V_{oc}) 和短路電流密度 (J_{sc})。對元件特性 PEDOT:PSS 層的開路電壓為 0.24 V 比標準元件 0.18 V 高約 33%。

開路電壓的增加可以解釋在元件較高的立體兩面之間的能階偏移量，PEDOT:PSS 層的存在比

沒有 PEDOT : PSS 的存在能階偏移量較少。

由於對直徑 4.5nm PbSe量子點含有 PEDOT : PSS層的功函數 5.1 eV，位置介於 5.3 eV的價帶^[25,28]和ITO電極的功函數 4.8eV之間，這種能帶的調整有利於電洞分離傳輸到陽極。

Fig. 1 的插入圖顯示了在元件各層中的能帶圖。短路電流值從未修飾的元件 18.0mA cm^{-2} 到結合PEDOT : PSS層 短路電流值提高到 21.9mA cm^{-2} ，增加約 20%，大概是因為較高的立體兩面之間界面接觸，因此，提高了PbSe量子點和PEDOT : PSS層之間載子傳輸。然而，這兩個元件的填充因子 (FFs) 卻相似。

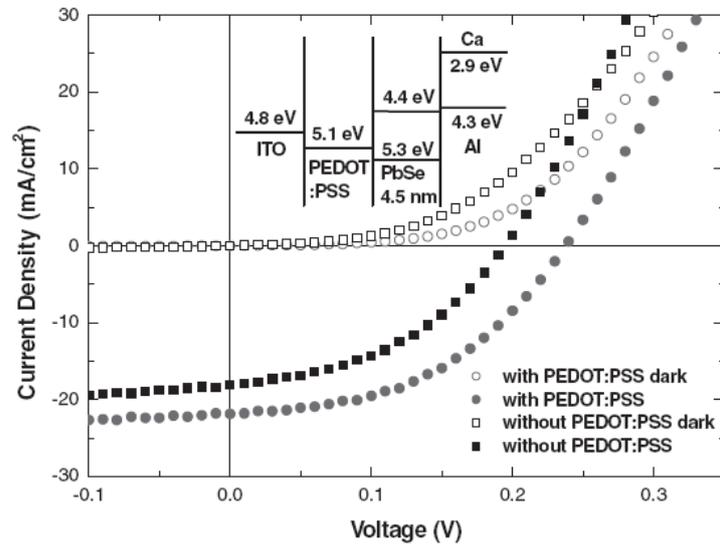


Fig. 1 直徑 4.5nm的PbSe量子點元件含有一PEDOT:PSS中間層的電流密度-電壓特性圖，紀錄下在暗電流和在太陽光模擬照射(100mW cm^{-2})下。插入圖：為一PbSe量子點的太陽能元件能階圖。

Table 1. 列出在 AM1.5G的太陽光 照明 100mW cm^{-2} 下PbSe量子點元件的電流密度-電壓特性，包含有PEDOT : PSS中間層。

Table 1. 在太陽光照射下硒化鉛量子點的性能參數元件含有PEDOT : PSS的中間層。

Device structure	V_{oc} [V]	J_{sc} [mA cm^{-2}]	FF [%]	η [%] [a]
ITO/PbSe/Ca/Al	0.19	18.0	44.0	1.5
ITO/PEDOT:PSS/PbSe/Ca/Al	0.24	21.9	45.5	2.4

[a] η : PCE. Solar: AM1.5G (100mW cm^{-2}).

Fig. 2(a)中提供了一個元件含有PEDOT : PSS層 (厚度: 20nm) 和PbSe量子點主動層 (厚度: $95\pm 5\text{nm}$) 橫截面TEM圖像，在主動層 (如: PbSe-1-PbSe-2 和PbSe-2-PbSe-3)，兩個介面都顯而易見。這主動層厚度 (約 95nm) 是最接近PbSe量子點元件的優化值。^[23-25]

仔細觀察的TEM圖像的元件結構顯示ITO/PEDOT : PSS/PbSe量子點/Ca/Al，PbSe量子點形成了一層緻密的與 PEDOT : PSS層是親密的自然接觸。從粗糙的ITO表面到PbSe量子點層，PEDOT : PSS層顯然提供了一個平穩的轉變。形成一個平坦的主動層，對高效率的元件作用是一個重要的特性，大概是由於PbSe量子點和PEDOT : PSS層之間的強極性相互作用。^[29]此外，在PbSe量子點層之間的界面粗糙度，含有 PEDOT : PSS層和ITO基板可使用同步輻射X射線反射 (XRR) 定量測量測定。Fig. 2(b)呈現存在和缺少PEDOT : PSS層在ITO基板上PbSe量子點薄膜 XRR的曲線。

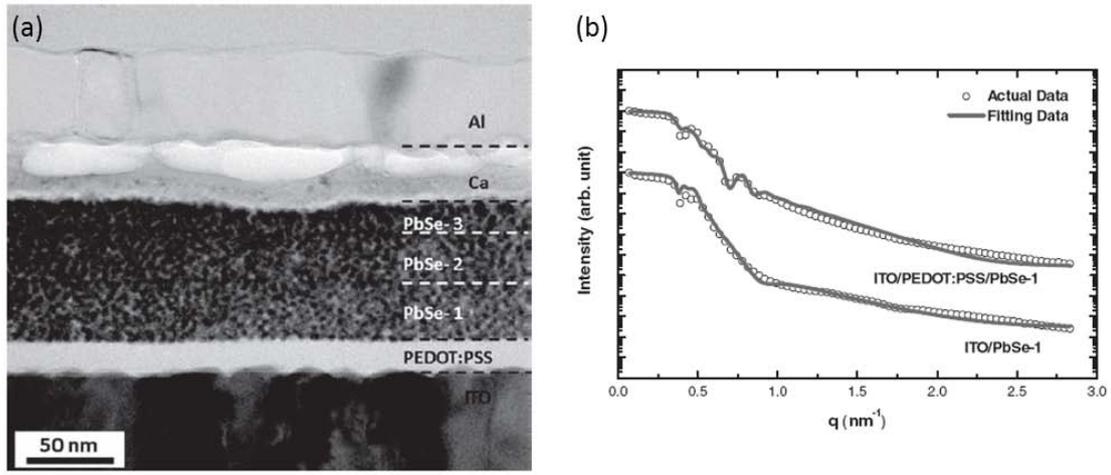


Fig. 2 (a) ITO/PEDOT : PSS/PbSe QD/Ca/Al元件的TEM橫截面圖像，比例尺：50nm。(b)對結構含有PbSe量子點層的同步輻射X射線反射率，製備有和沒有PEDOT : PSS薄膜層。

該元件含有PEDOT : PSS層的曲線顯示振盪行為在 0.3 和 1.0nm^{-1} 之間；該元件缺乏PEDOT : PSS層似乎被剝奪一些特性，進一步提供的證據顯示，在元件中 PEDOT : PSS層的存在 降低該界面的粗糙度，因為在層與層之間界面自然的平坦效果是成反比在X射線反射率曲線是平滑的。Table 2 列出了界面粗糙度參數獲得由XRR數據的曲線調整。^[30] 元件的製備沒有 PEDOT:PSS於ITO基板和PbSe層之間有一個粗糙， $\sigma_{\text{ITO/PbSe-1}}$ ，為 2.9nm 。經過ITO基板上含有一PEDOT : PSS層，PEDOT:PSS和PbSe量子點層之間的界面粗糙度， $\sigma_{\text{PEDOT:PSS/PbSe-1}}$ ，成為 1.0nm ，相對於原來的ITO-PbSe量子點界面幾乎對三個方面改善。

此外，調整結果顯示 PEDOT : PSS 層，不僅降低了 ITO/PbSe 量子點基底的界面粗糙度，也使單獨的旋塗 PbSe 量子點層界面平坦；PEDOT : PSS 層的存在 $\sigma_{\text{PbSe-1/PbSe-2}}$ 的值下降了 2.8nm ，不存在時為 5.0nm 。

Table 2. 藉由調整不同層結構的X射線反射率曲線獲得界面粗糙度的數據。

ITO/PbSe QDs structure interfacial roughness	[nm]	ITO/PEDOT:PSS/PbSe QDs structure interfacial roughness	[nm]
$\sigma_{\text{ITO/PbSe-1}}$	2.9	$\sigma_{\text{ITO/PEDOT:PSS}}$	3.1
—	—	$\sigma_{\text{PEDOT:PSS/PbSe-1}}$	1.0
$\sigma_{\text{PbSe-1/PbSe-2}}$	5.0	$\sigma_{\text{PbSe-1/PbSe-2}}$	2.8

Fig. 3(a)呈現PbSe量子點元件的電流密度-電壓曲線圖具有不同的量子點大小存在PEDOT : PSS層，Table 3 列出了這些PbSe量子點元件的光電特性。元件的 V_{oc} 值從 0.24 下降到 0.14V ，而 J_{sc} 值從 21.9 下降到 17.7mA cm^{-2} ，根據 PbSe量子點的大小的增加從 4.5 到 6.0nm 。量子點尺寸的增加 V_{oc} 會減少，主要是由於相對應的價帶(VB)和PbSe量子點的帶隙(BG)變窄。Fig. 3(b)呈現元件含有不同的PbSe量子點的大小及 V_{oc} 的值繪製其帶隙(E_g)方面，而我們如文獻報導從它們的大小判斷。^[25,28] 我們注意到對元件含有和缺少PEDOT : PSS層在 V_{oc} 對 E_g 的繪圖中呈線性行為。這些元件含有PEDOT : PSS層，PbSe量子點的 V_{oc} 和 E_g 的值近乎於線性行為可以用經驗公式描述：

$$V_{oc}=0.65 (E_g/e) - 0.30V$$

而 e 是一個電子的電荷。線性的斜率(0.65)接近文獻對元件含有類似量子點的報告。^[26]在 J_{sc} 的

元件減少是由於增加了界面粗糙度想必當PbSe量子點的大小增加。

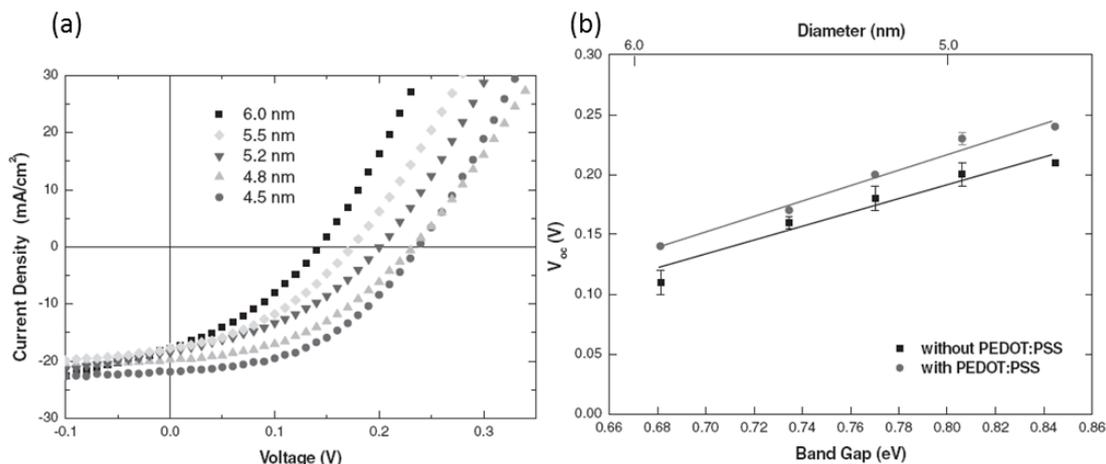


Fig. 3 (a)含有PEDOT:PSS層和不同平均直徑硒化鉛量子點的元件電流密度-電壓繪製。(b)開路電壓(V_{oc})及關於PbSe量子點的直徑和元件的能隙(E_g)製備有和沒有PEDOT:PSS層。

Table 3. 在太陽光照射下PbSe量子點不同的平均直徑和含有PEDOT:PSS的中間層的元件參數。

PbSe QD size [nm]	V_{oc} [V]	J_{sc} [mA cm^{-2}]	FF [%]	η [%]
6.0	0.14	17.7	34.9	0.86
5.5	0.17	17.8	39.0	1.18
5.2	0.20	18.5	38.2	1.41
4.8	0.23	19.7	43.4	1.97
4.5	0.24	21.9	45.5	2.40

Fig. 4(a)呈現元件在300到1800 nm波長區域外部量子效率(EQE)為ITO/PbSe量子點/Ca /Al (標準元件)和ITO/ PEDOT:PSS/PbSe量子點/Ca /Al。該元件含有PEDOT:PSS呈現出比標準元件較大的EQE值在650nm且覆蓋整個可見光範圍(360~1000nm)和一小部分的近紅外範圍(1100~1300nm)，元件含有PEDOT:PSS層EQE達到了57%，而標準元件46%。理論上短路電流密度為元件EQE曲線積分後分別為含有PEDOT:PSS為 21.6 mA cm^{-2} 和標準元件為 17.9 mA cm^{-2} ，這些值是接近的(分別 21.9 和 18.0 mA cm^{-2})獲得直接從電流密度-電壓曲線，證實了我們的測量精度。Fig. 4 (b) 表明短路電流密度和入射光強度之間約成線性關係的存在，涵蓋範圍從0到 100 mW cm^{-2} ，使人聯想到這種元件的型態還可以當一個光電探測器使用。

接下來，我們測試我們的太陽能元件於同時存在和連續的AM1.5G照明和電流-電壓掃描的耐用性。由於PbSe量子點為基礎的裝置對空氣敏感的，已有被報導其暴露在空氣中具有瞬間退化，^[19,23]我們所有的元件都在量測前封裝的環境條件下測得。

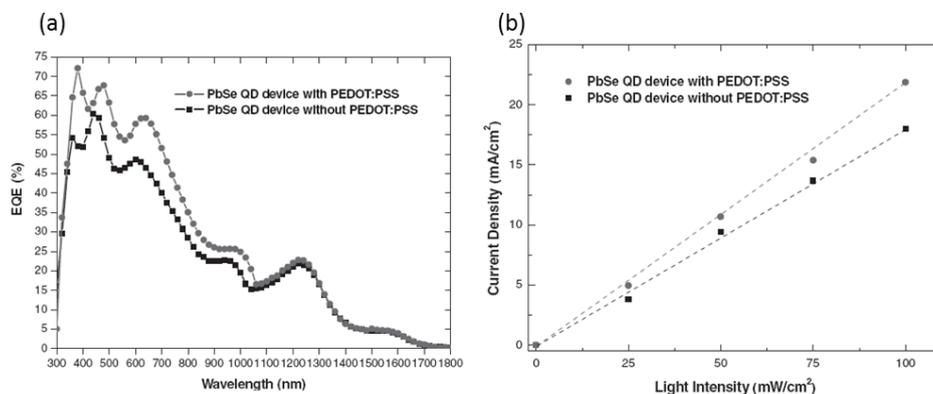


Fig. 4 (a)製備有和沒有PEDOT:PSS層的硒化鉛量子點元件外部量子效率(EQE)光譜。(b)製備有和沒有PEDOT:PSS層的硒化鉛量子點元件光電流密度(J_{SC})繪製關於太陽光的強度變化。

Fig. 5顯示元件含有PEDOT:PSS層的能量轉換效率穩定性，大大地相對高於缺少PEDOT:PSS層的元件。特別是，該元件就時間而論，須要達到一般效率的80%，對PbSe量子點標準元件和PbSe量子點元件含有PEDOT:PSS層，時間尺度來衡量分別為20和120分鐘，對於後者有六倍改善。值得注意的是，元件含有PEDOT:PSS層顯示在其前60分鐘 J_{sc} 的操作和FF值幾乎不變，相反，其 V_{oc} 值逐漸下降。由於含有PEDOT:PSS層可以導致各層之間的界面平坦，相對於元件缺乏PEDOT:PSS層，堆疊PbSe量子點因此變得更好，並有可能減少缺陷和裂縫採用於元件結構。因此，降低在連續照明中有PEDOT:PSS層的元件 V_{oc} 會減慢，這反過來又緩和了元件的能量轉換效率的降低。

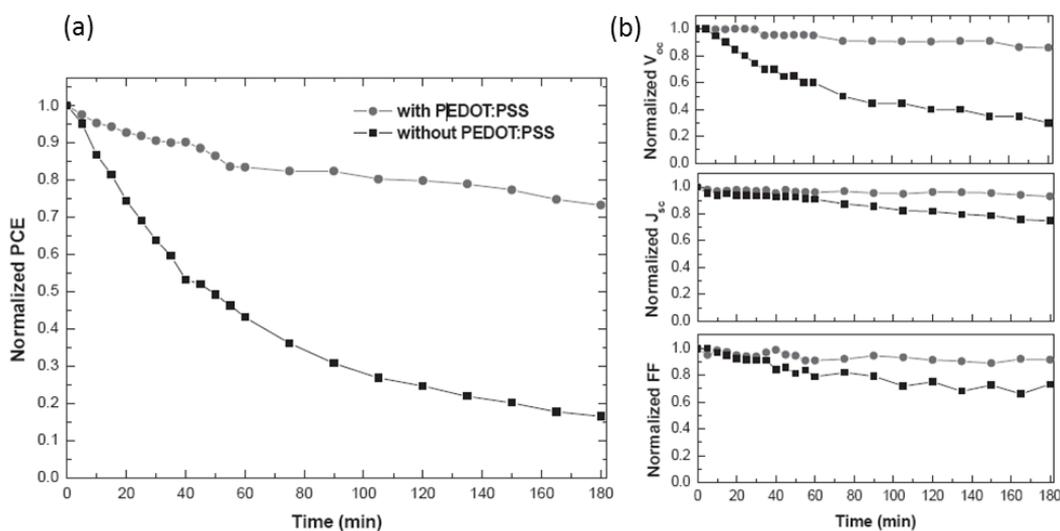


Fig. 6 (a)能量轉換效率 (PCE)，(b)開路電壓 (V_{oc})，短路電流(J_{sc})和填充因子 (FF)，測量以時間函數和標準化方面的初步測量值為元件製備分成有和沒有 PEDOT:PSS為中間層，連續照光於太陽光模擬器下 AM1.5G(100 mW cm^{-2})。

Part 2.

Fig. 7 (a)呈現PbSe QD薄膜的傅立葉轉換紅外線光譜(FTIR)經實驗處理有不同的配體;這些光譜確認了PbSe QD薄膜表面的化學物質的性質。我們的薄膜PbSe QD有OA包覆，以兩種不同的配體處理過程：(i) BA交換和(ii)BA交換其後EDT處理。訊號的呈現對COO⁻伸展在 1400 和 1530 cm^{-1} BA包覆量子薄膜的紅外線光譜表明一些OA單元已被移除;在PbSe量子點包覆OA到PbSe量子點BA交

換薄膜的FTIR光譜下比較COO-伸直區域下的面積顯示14%的OA配體經由在無水的BA混合過程中被移除。BA-交換量子點薄膜的光譜有一微弱的訊號範圍在3250到3400 cm^{-1} ，表示存在著氨基酸群體。雖然只是部分完成這BA配體的交換在硒化鉛量子點，是為了改善後面在旋轉鍍PbSe量子點薄膜的品質，藉由降低在PbSe量子點薄膜區域晶界，造成BA交換的PbSe量子點薄膜相對於在最初製備包覆oleate的PbSe量子點來的平坦。

此外，在EDT處理的PbSe量子膜的光譜訊號的強度COO-和C-H單位兩者大大減少了，這表明在PbSe量子點的大部分OA配體已被交換，因為thiol-Pb鍵比amine-Pb或carboxyl-Pb鍵強很多。^[33]進一步的證據支持這一論點提供了一訊號的呈現EDT配體的S-C鍵頻譜650~680 cm^{-1} 。

Fig.7 (b)顯示PbSe量子點薄膜的吸收光譜包覆不同的配體。第一激子吸收量子點包覆OA的薄膜的吸收峰位於1455 nm；平均PbS量子點的大小為4.6nm，從TEM影像判斷圖在Fig. S2。鑑於的PbSe量子點薄膜的吸收光譜與PbSe量子點在能量轉換效率相似（數據未顯示），我們可以使用公式（1）計算PbSe量子點的大小，它描述了一個的取決於的PbSe量子點的顆粒大小在溶液中的第一個吸收峰的位置：^[59]

$$D = (\lambda - 143.75) / 281.25$$

而D(nm)是PbSe量子點的平均顆粒直徑和 λ (nm)相對應試片的第一吸收峰位置。對PbSe量子點判斷尺寸(4.6nm)與對PbSe量子點使用方程式(1)直徑計算(4.66nm)有良好一致性。

此外，BA處理PbSe量子點薄膜和隨後PbSe量子點薄膜經過EDT處理，顯示出他們第一激子吸收峰分別在 1496 和 1542 nm。因此，相對於包覆OA的量子薄膜的信號分別紅位移 41 和 87nm，意味著對BA-和PbSe配體的PbSe量子點薄膜有較高的堆積密度，大概是因為分別加強了偶極-偶極的相互作用和量子點的交聯。這種相互作用降低了PbSe量子點間的距離，反過來又導致增加了量子點的堆積密度和電導率。^[60]

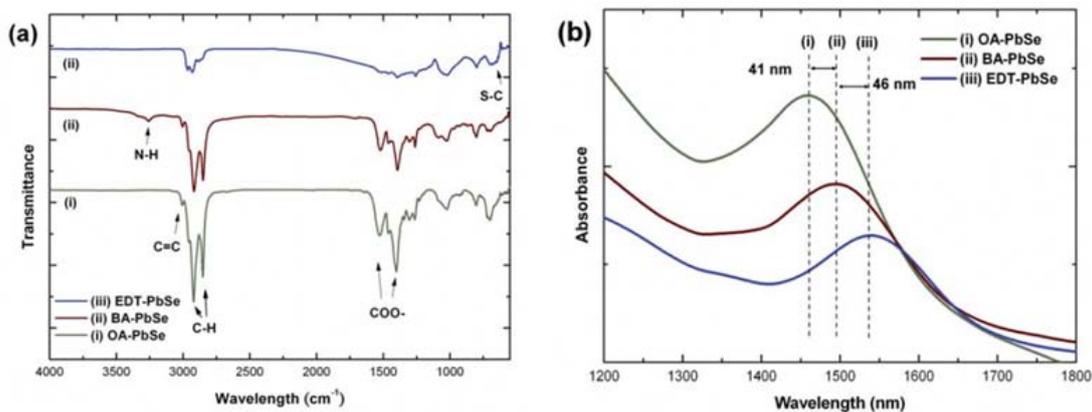


Fig. 7 (a)ATR-FTIR光譜和(b)PbSe量子點薄膜光吸收光譜，分別包覆(i)OA(ii)BA和(iii)EDT，製備透過旋塗置備於基板上，PbSe量子點平均膜厚4.6nm。

我們使用XPS檢測的PbSe量子點薄膜表面元素物種的存在。Fig. 8 (a)顯示了一個強的訊號O原子和一微弱的訊號C原子的，分別為 531 和 287.8 eV的鍵結能，我們把他們歸屬於OA單位的carboxylate基團的O和C原子，此外，我們把對C原子一訊號在 284.7eV為烷基鏈的OA單位。在BA交換量子膜對O和C原子的訊號強度稍微的下降，是與從PbSe量子點表面 OA配體的部份移除是一致的。BA-交換量子點薄膜的氮原子光譜，特徵在 399.1 eV有一訊號，顯示單位BA的amino基團的

存在。同時缺乏O原子的訊號和降低在EDT處理薄膜上的C原子的訊號的強度，是與OA配體被移除的事實是一致的。此外，在EDT處理的薄膜顯示在 161.8 eV的S原子的訊號，與S原子鍵結到PbSe量子點表面似thiolate種類一致。

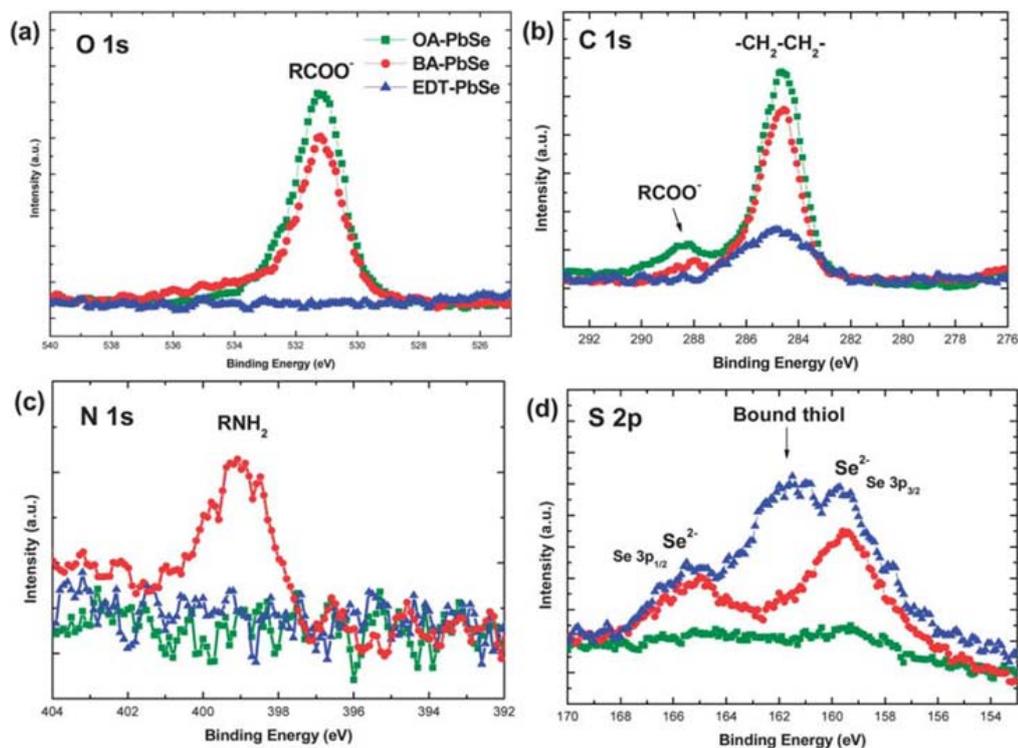


Fig. 8 分別包覆OA(方型)、BA(圓型)、EDT(三角)PbSe量子點薄膜的XPS光譜。試片是旋塗在Si基板上和不暴露於空氣中測量。

Fig. 9 顯示PbSe量子點薄膜的TEM照，(100) 投影，OA-包覆，BA-交換和EDT-處理的局部地區。圖3(a)顯示OA-包覆薄膜的TEM影像，顯示一大面積規則的PbSe量子點在以一方塊狀組裝，表示3D超晶格具有同時在Cu網上一一起成核和成長。OA的PbSe量子點快速傅立葉變換 (FFT) (在插入Fig. 9(a)) 的影像，顯示了在三維有序的超晶格有四倍的對稱性，與PbSe量子點在TEM圖像的方塊狀組裝圖案一致。據報導當過程中在約 $0.5\sim 5.0\text{ mg ml}^{-1}$ 的濃度時，PbSe量子點形成六角形自組裝。^[45]我們懷疑，我們的大面積方形的量子點組裝形成，是因為我們做旋塗處理在一個較高的PbSe量子點濃度。當我們改變了OA處理的PbSe量子點溶液的濃度或薄膜環境，薄膜的形態可能會變得很不一樣；使用稀釋的PbSe量子點溶液(50 mg mL^{-1})得到一薄膜的TEM影像在Fig. S5a (ESI,†)，顯示PbSe量子點的方形自組裝在薄膜較厚的區域範圍內，而周圍較薄的地區，特徵為一個六角形的組裝。Fig. S5b (ESI,†)呈現暴露在空氣中後的OA包覆PbSe量子點薄膜的超晶格TEM影像；經過2天的暴露量子點超晶格轉變成一個大多是六角形組裝。Fig. 9 (b)顯示EDT處理PbSe量子點的TEM影像；這薄膜特色為一混亂相，因為經過EDT處理過程中自由體積的損失，導致應力成長和無規則區域的形成，在該地區有一約100nm的平均大小。FFT影像插入於Fig. 9 (c)顯示模糊的方形對稱，表明的PbSe量子點薄膜的超晶格結構區域被破壞和變得混亂。

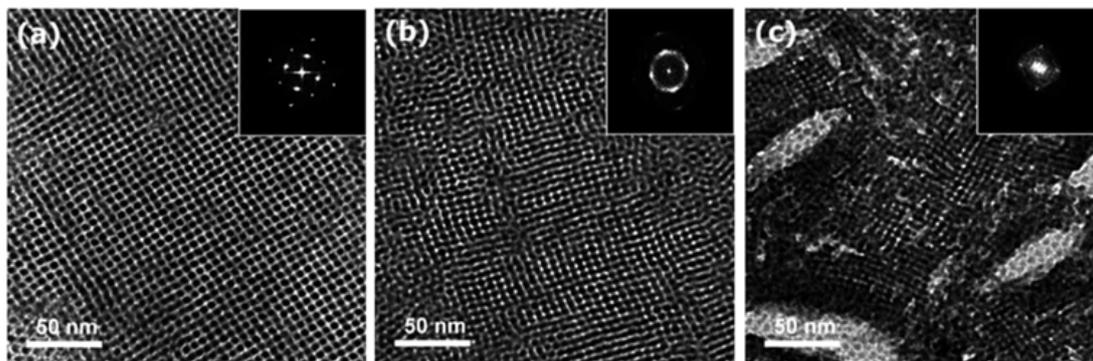


Fig. 9 3D排列超晶格的PbSe量子點薄膜包覆(a)OA(b)BA和(c)EDT有(100)的晶格投影(尺寸50nm)插入圖:對應於FFT圖案顯示超晶格的規則度。試片製備於PbSe量子點溶液旋轉塗佈(濃度:80mg mL⁻¹)於銅網,固定於玻璃基板上及惰性氣氛下。

Fig. 10 (a)顯示同步輻射X射線光線掃描記錄沿著表面法線到旋塗PbSe量子點薄膜於Si基板並包覆OA, BA和EDT。實線是X光反射率(XRR)部分的光線掃描數據的擬合曲線。我們模擬的鏡面反射率,使我們能夠獲得的多層的物理參數,是根據Parratt的遞歸形式主義;^[30]我們利用Bede_{REFS} Mercury code軟體模擬調整曲線來決定多層的物理參數,包含粗糙度,厚度和強度。Table S1(ESI[†])詳細列出XRR參數。在Fig. 10 (a), BA-和EDT-處理PbSe量子點薄膜的X光反射率(XRR)取線擬合顯示比OA-包覆PbSe量子點薄膜有更多顯著的震盪,提供直接證據BA和EDT的PbSe量子點的處理薄膜的粗糙度下降。從擬合的數據,我們獲得的PbSe量子點薄膜包覆OA 8.0nm的粗糙度;BA交換和EDT處理PbSe量子此值兩者只有3.8nm—與初始的量子點薄膜幾乎有2倍的改善。此外,全反射的臨界角,以虛線表示,大幅增加—這意味著在平均薄膜密度的增加—在我們以BA或EDT處理PbSe量子點後。對OA包覆、BA包覆和EDT處理PbSe量子點薄膜擬合密度分別為1.86、3.56和4.69 g cm⁻³。有EDT的BA交換PbSe量子點薄膜處理造成的薄膜厚度從62減少到45nm,與在薄膜密度增加具有相關聯。在Fig. 10 (a)第一峰,表明由箭頭和從薄膜的相應的一階Bragg衍射,當PbSe量子點以BA或EDT處理往更高的q值轉移,顯示了更小的粒子間間距 在堆疊方向沿著薄膜的表面法線。具體來說,BA交換減少表面法線的D_z-間距(d_z)從6.83到5.92 nm,與OA配體的部分移除一致。以EDT進一步處理大部份的OA配體移除,並導致表面法線4.72nm的d_z,在所有的案例中跌幅最大。BA交換的寬廣第一個峰和EDT處理過的薄膜表示這種化學處理破壞了OA處理PbSe量子點薄膜的超晶格規則度,結果PbSe量子點層經過OA移除受到破壞。Fig. 10 (b)顯示X射線在平面晶體斷柱法(CTR)沿方向(H00)方向。對於PbSe量子點薄膜上包覆有OA和BA, d間距在x方向上頗為相似; q_z值為0.87nm⁻¹ (dx=7.22nm) 前者和0.85 nm⁻¹的 (dx=7.39nm) 後者。對於PbSe量子點薄膜有EDT包覆,然而表面法線(d_z)的值和平面(d_x)下降到4.72和6.48nm, OA包覆PbSe量子點薄膜分別為6.83和7.22 nm。

此外,這些量子點薄膜的方位掃描(Pha掃描)(Fig. S3, ESI[†])所有顯示的四倍對稱,這意味著PbSe量子點薄膜在ab平面保持方形的組裝結構,與TEM結果一致。此外,當使用ITO/PEDOT:PSS或Si基板時在平面CTR和PbSe量子點薄膜方位掃描之間差別不大(Fig. S4, ESI[†]),也就是說,在PbSe量子點薄膜的結構沒有基板效應。Table 4 列出了PbSe量子點薄膜包覆 OA、BA和EDT同步加速器X射線的特徵。

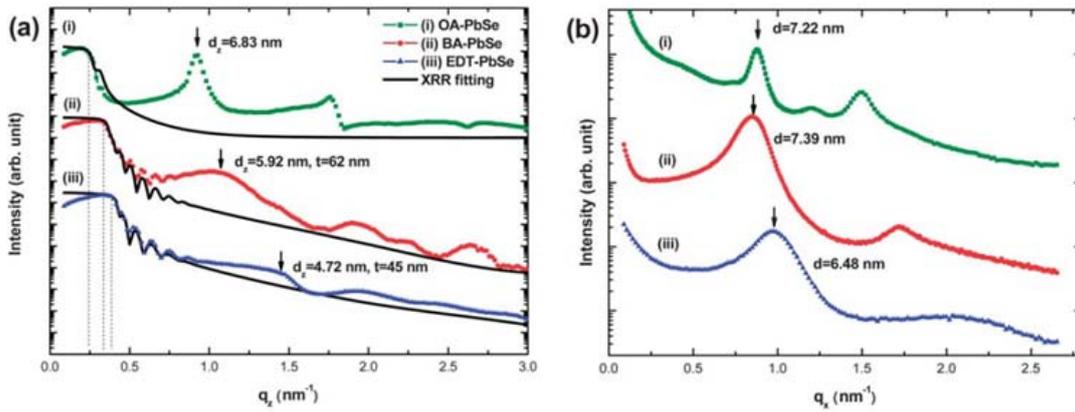


Fig. 10 概況 (a) 的同步加速器X射線沿著表面掃描，XRR調整及 (b) 在平面CTR掃描(i)OA-，(ii)BA-，(iii)EDT含有的硒化鉛量子點薄膜，製備透過旋塗於Si基板上（log取一般範圍）。

Table 4沿表面的同步輻射X射線掃描數據表面法線和平面晶體截斷棒(CRT)掃描配體包覆PbSe量子點薄膜。PbSe量子點的平均規模：4.6nm。

	OA-PbSe	BA-PbSe	EDT-PbSe
Thickness (nm)	140	62	45
Roughness (nm)	8	3.8	3.8
Average density of film (g cm^{-3})	1.86	3.56	4.69
Surface-normal d -space (nm)	6.83	5.92	4.72
In-plane d -space (nm)	7.22	7.39	6.48
Ordering of superlattice	good	poor	very poor

Fig. 11 呈現出不同配位基的PbSe量子點元件的電流密度-電壓圖，每個元件都有PEDOT:PSS 電動傳導層來增加元件的表現及穩定性。各元件的主動層厚度為 120 ± 20 nm。OA為附著基的膠體量子點粒子元件有較低的效率，因為OA附著基是 18 個碳的長碳鏈，會導致較低的電子傳導能力。BA附著基的膠體量子點粒子元件，其短路電流(J_{sc})，開路電壓(V_{oc}) 和填充因子(FF) 為 1.58 mA cm^{-2} ， 0.23 V ，和 0.39 。EDT為附著基的膠體量子點粒子元件，其 J_{sc} 、 V_{oc} 和FF的值為 15.0 mA cm^{-2} ， 0.16 V ，和 0.37 。如同我們所預料的，BA及EDT為附著基的膠體量子點粒子元件的 J_{sc} 明顯高於OA附著基的元件。此外，EDT為附著基的膠體量子點粒子元件的 J_{sc} 大約為BA附著基的 9 倍。EDT為附著基的膠體量子點粒子元件的 J_{sc} 值較大，由於硫醇末端基交聯可減少粒子間的空間和增加膜的密度。 V_{oc} 的降低源自於膠體量子點粒子的膜厚降低。

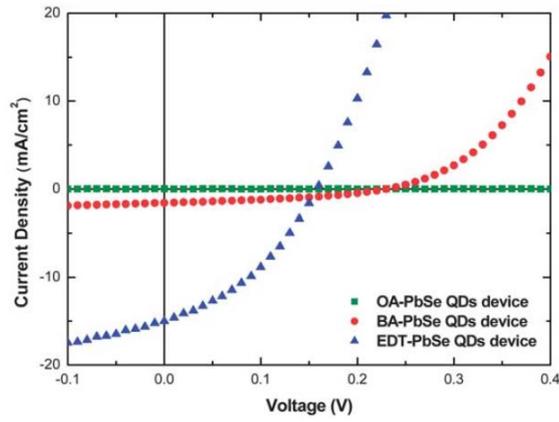


Fig. 11 接上配體的PbSe量子點元件的電流-電壓特性圖，基板為ITO/PEDOT:PSS，配體分別OA包覆、BA交換與經由1mM EDT處理5秒的BA交換。元件量測環境為AM1.5 G(100 mW cm^{-2})。

目前為了增加PbSe膠體粒子元件的效能，可利用LBL成膜技術製程元件，把中間物BA附著基取代過程中的溶液以EDT成膜成固相的溶液為主。Fig. 12 (a)顯示4.6 nm直徑的PbSe量子點粒子，膜厚為 $110 \pm 10 \text{ nm}$ 的元件在室溫且氮氣手套箱內，AM 1.5G下，電流密度與電壓圖。此元件的最高效率(PCE)為2.45%，是以PbSe膠體粒子，4次沉積在ITO/PEDOT:PSS基材上所製成。Table 5 列出，PbSe膠體量子點粒子的光伏元件，在太陽放光下的元件表現參數。Fig. 12 (b)呈現PbSe QD元件在波長範圍為300至1800nm(包含全部可見光即部份近紅外光光譜範圍)的最佳EQE曲線。理論上短路電流的密度需要由EQE曲線積分而得，此元件的短路電流為 23.6 mA cm^{-2} ；此值近於由電流電壓曲線所得的短路電壓值(26.4 mA cm^{-2})，確認出我們實驗量測上的正確性。

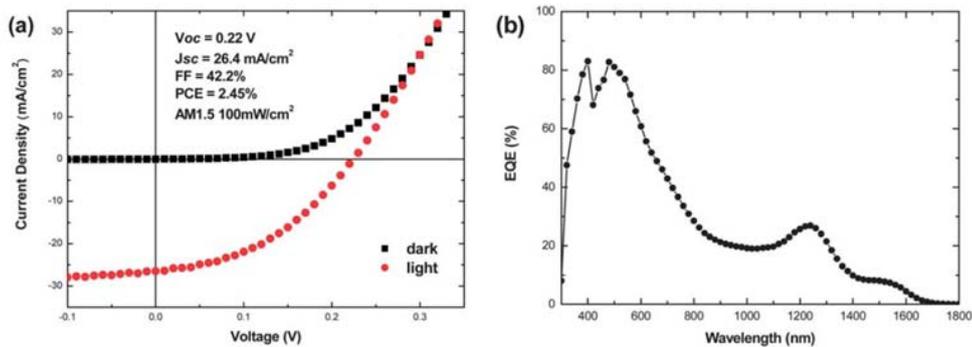


Fig. 12 PbSe量子點結合EDT之元件的(A)電流-電壓特性圖與(B)EQE光譜圖。使用LBL技術於ITO/PEDOT:PSS基板上製程，於AM1.5 G(100 mW cm^{-2})量測。

Table 5 在太陽光照射下測量PbSe量子點元件的光伏特參數。元件結構: ITO/PEDOT:PSS/PbSe QDs/Ca/Al。

	V_{oc}^a (V)	J_{sc}^b (mA cm ⁻²)	FF ^c (%)	η^d (%)
OA-capped film	—	—	—	—
BA-exchanged film	0.23	1.58	39	0.14
EDT-treated film	0.16	15.0	37	0.89
EDT-treated film (LBL)	0.22	26.4	42	2.45

^a V_{oc} : Open-circuit voltage. ^b J_{sc} : Short-circuit current density. ^c FF: Fill factor. ^d η : PCE. Solar: AM1.5 G (100 mW cm⁻²).

結論

Part 1.

我們製備光伏元件特徵是有一個PEDOT:PSS空穴傳輸層和三種可單獨沉積PbSe量子點層。PbSe太陽能元件結合PEDOT:PSS層顯示在AM1.5能量轉換效率上有增強，相對於缺乏空穴傳輸層元件為60%的增強因子。以X射線反射率測量界面粗糙度在PEDOT:PSS和PbSe量子點層之間幾乎是原來的ITO-PbSe量子點界面的三倍。因此，PEDOT:PSS層的存在不僅提供PbSe量子點層和ITO基板界面之間平坦度，而且導致 V_{oc} 的提高。此外，PEDOT:PSS空穴傳輸層的存在延長了壽命時間，以量測時間來論須達到一般效率的80%，是PbSe量子點太陽能元件的六倍，表示這一方法提高了PbSe量子點太陽能元件的性能。

Part 2.

OA，BA，和EDT的配體會影響PbSe量子點的組裝和光伏特性能沉積在薄膜的形式。這些配體誘使改變在粒子間的間距顯著影響PbSe量子點薄膜的規則度，從超晶格到混亂形式。對於PbSe量子點薄膜含有BA和EDT，粗糙度下降，相對於PbSe量子點薄膜以OA的包覆的平均密度增加。特別是，PbSe量子點的垂直堆疊，經過EDT處理後對電荷傳輸的重要性，大幅增加。因此，含有EDT處理的PbSe量子點元件當作主動層能量轉換效率遠高於相應的包覆OA的PbSe量子點元件。此外，應用LBL的製造技術增強了PbSe量子點元件的能量轉換效率為2.45%。

5. 參考文獻

Part 1.

- [1] J. Y. Kim , K. Lee , N. E. Coates , D. Moses , T. Q. Nguyen , M. Dante , A. J. Heeger , *Science* **2007** , 317 , 222 .
- [2] (a) L. M. Chen , Z. Hong , G. Li , Y. Yang , *Adv. Mater.* **2009** , 21 , 1434 ;
(b) Y. T. Chang , S. L. Hsu , M. H. Su , K. H. Wei , *Adv. Mater.* **2009** , 21 , 2093 .
- [3] I. Gur , N. A. Fromer , M. L. Geier , A. P. Alivisatos , *Science* **2005** , 310 , 462 .
- [4] J. Tang , X. Wang , L. Brzozowski , D. A. R. Barkhosue , R. Debnath , L. Levina , E. H. Sargent , *Adv. Mater.* **2010** , 22 , 1398 .
- [5] D. V. Talapin , C. B. Murray , *Science* **2005** , 310 , 86 .
- [6] S. A. McDonald , G. Konstantatos , S. Zhang , P. W. Cyr , E. J. D. Klem , L. Levina , E. H. Sargent , *Nat. Mater.* **2005** , 4 , 138 .
- [7] N. Cho , K. R. Choudhury , R. B. Thapa , Y. Sahoo , T. Ohulchanskyy , A. N. Cartwright , K. S. Lee , P. N. Prasad , *Adv. Mater.* **2007** , 19 , 232 .
- [8] H. Y. Chen , M. K. F. Lo , G. Yang , H. G. Monbouquette , Y. Yang , *Nat. Nanotechnol.* **2008** , 3 , 543 .
- [9] Z. Tan , T. Zhu , M. Thein , S. Gao , A. Cheng , F. Zhang , C. Zhang , H. Su , J. Wang , R. Henderson , J. Hahn , Y. Yang , J. Xu , *Appl. Phys. Lett.* **2009** , 95 , 063510 .
- [10] (a) J. Hou , H. Y. Chen , S. Zhang , R. I. Chen , Y. Yang , Y. Wu , G. Li , *J. Am. Chem. Soc.* **2009** , 131 , 15586 ;
(b) Y. Liang , Z. Xu , J. Xia , S. T. Tsai , Y. Wu , G. Li , C. Ray , L. Yu , *Adv. Mater.* **2010** , 22 , E135 .
- [11] M. A. Hines , G. D. Scholes , *Adv. Mater.* **2003** , 15 , 1844 .
- [12] R. Koole , G. Allan , C. Delerue , A. Meijerink , D. Vanmaekelbergh , A. J. Houtepen , *Small* **2008** , 4 , 127 .
- [13] K. Roy Choudhury , Y. Sahoo , T. Y. Ohulchanskyy , P. N. Prasad , *Appl. Phys. Lett.* **2005** , 87 , 073110 .
- [14] M. C. Beard , A. G. Midgett , M. Law , O. E. Semonin , R. J. Ellingson , A. J. Nozik , *Nano Lett.* **2009** , 9 , 836 .
- [15] V. Sukhovatkin , S. Hinds , L. Brzozowski , E. H. Sargent , *Science* **2009** , 324 , 1542 .
- [16] R. D. Schaller , V. I. Klimov , *Phys. Rev. Lett.* **2004** , 92 , 186601 .
- [17] J. M. Luther , J. Gao , M. T. Lloyd , O. E. Semonin , M. C. Beard , A. J. Nozik , *Adv. Mater.* , DOI: 10.1002/adma.201001148.
- [18] H. Lee , H. C. Leventis , S. J. Moon , P. Chen , S. Ito , S. A. Haque , T. Torres , F. Nüesch , T. Geiger , S. M. Zakeeruddin , M. Grätzel , Md. K. Nazeeruddin , *Adv. Funct. Mater.* **2009** , 19 , 2735 .
- [19] T. Rauch , M. Böberl , S. F. Tedde , J. Fürst , M. V. Kovalenko , G. Hesser , U. Lemmer , W. Heiss , O. Hayden , *Nat. Photonics* **2009** , 3 , 332 .
- [20] M. S. Kang , J. Lee , D. J. Norris , C. D. Frisbie , *Nano Lett.* **2009** , 9 , 3848 .
- [21] J. M. Luther , M. Law , Q. Song , C. L. Perkins , M. C. Beard , A. J. Nozik , *ACS Nano* **2008** , 2 , 271 .
- [22] G. I. Koleilat , L. Levina , H. Shukla , S. H. Myrskog , S. Hinds , A. G. Pattantyus-Abraham , E. H. Sargent , *ACS Nano* **2008** , 2 , 833 .
- [23] J. M. Luther , M. Law , M. C. Beard , Q. Song , M. O. Reese , R. J. Ellingson , A. J. Nozik , *Nano Lett.* **2008** , 8 , 3488 .
- [24] W. Ma , J. M. Luther , H. Zheng , Y. Wu , A. P. Alivisatos , *Nano Lett.* **2009** , 9 , 1699 .

- [25] J. J. Choi , Y. F. Lim , M. B. Santiago-Berrios , M. Oh , B. R. Hyun , L. Sun , A. C. Bartnik , A. Goedhart , G. G. Malliaras , H. D. Abruña , F. W. Wise , T. Hanrath , *Nano Lett.* **2009** , 9 , 3749 .
- [26] K. S. Leschkies , T. J. Beatty , M. S. Kang , D. J. Norris , E. S. Aydil , *ACS Nano* **2008** , 3 , 3638 .
- [27] G. Li , V. Shrotriya , J. Huang , Y. Yao , T. Moriarty , K. Emery , Y. Yang , *Nat. Mater.* **2005** , 4 , 864 .
- [28] D. Cui , J. Xu , T. Zhu , G. Paradee , S. Ashok , M. Gerhold , *Appl. Phys. Lett.* **2006** , 88 , 183111 .
- [29] D. M. N. M. Dissanayake , R. A. Hatton , T. Lutz , R. J. Curry , S. R. P. Silva , *Nanotechnology* **2009** , 20 , 245202 .
- [30] L. G. Parratt , *Phys. Rev.* **1954** , 95 , 359 .
- [31] W. W. Yu , J. C. Falkner , B. S. Shih , V. L. Colvin , *Chem. Mater.* **2004** , 16 , 3318 .
- [32] G. Konstantatos , I. Howard , A. Fischer , S. Hoogland , J. Clifford , E. Klem , L. Levina , E. H. Sargent , *Nature* **2006** , 442 , 180 .
- [33] M. V. Kovalenko , D. V. Talapin , M. A. Loi , F. Cordella , G. Hesser , M. I. Bodnarchuk , W. Heiss , *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008** , 47 , 3029 .
- [34] H. Y. Chen, J. Hou, S. Zhang, Y. Liang, G. Yang, Y. Yang, L. Yu, Y. Wu and G. Li, *Nat. Photonics*, 2009, 3, 649–653.
- [35] W. J. E. Beek, M. M. Wienk and R. A. J. Janssen, *J. Mater. Chem.*, 2005, 15, 2985–2988.
- [36] J. C. Hindson, B. Ulgut, R. H. Friend, N. C. Greenham, B. Norder, A. Kotlewski and T. J. Dingemans, *J. Mater. Chem.*, 2010, 20, 937–944.
- [37] P. Peumans, S. Uchida and S. R. Forrest, *Nature*, 2003, 425, 158–162.
- [38] F. Odobel, E. Blart, M. Lagr_ee, M. Villieras, H. Boujtita, N. El Murr, S. Caramori and C. Alberto Bignozzi, *J. Mater. Chem.*, 2003, 13, 502–510.
- [39] W. A. Tisdale, K. J. Williams, B. A. Timp, D. J. Norris, E. S. Aydil and X. Y. Zhu, *Science*, 2010, 328, 1543–1547.
- [40] M. T. Zin, A. M. Munro, M. Gungormus, N. Y. Wong, H. Ma, C. Tamerler, D. S. Ginger, M. Sarikaya and A. K.-Y. Jen, *J. Mater. Chem.*, 2007, 17, 866–872.
- [41] M. Law, J. M. Luther, Q. Song, B. K. Hughes, C. L. Perkins and A. J. Nozik, *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, 130, 5974–5985.
- [42] A. Kongkanand, K. Tvrđy, K. Takechi, M. Kuno and P. V. Kamat, *J. Am. Chem. Soc.*, 2008, 130, 4007–4015.
- [43] B. Sun and N. C. Greenham, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2006, 8, 3557–3560.
- [44] C. H. Henry, *J. Appl. Phys.*, 1980, 51, 4494–4500.
- [45] K. R. Choudhury, Y. Sahoo, T. Y. Ohulchanskyy and P. N. Prasad, *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 87, 073110.
- [46] K. Szendrei, W. Gomulya, M. Yarema, W. Heiss and M. A. Loi, *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 97, 203501.
- [47] K. R. Choudhury, D. W. Song and F. So, *Org. Electron.*, 2010, 11, 23–28.
- [48] M. Ji, S. Park, S. T. Connor, T. Mokari, Y. Cui and K. J. Gaffney, *Nano Lett.*, 2009, 9, 1217–1222.
- [49] R. Debnath, J. Tang, D. A. Barkhouse, X. Wang, A. G. Pattantyus-Abraham, L. Brzozowski, L. Levina and E. H. Sargent, *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, 132, 5952–5953.
- [50] C. Y. Kuo, M. S. Su, Y. C. Hsu, H. N. Lin and K. H. Wei, *Adv. Funct. Mater.*, 2010, 20, 3555–3560.
- [51] J. M. Luther, J. Gao, M. T. Lloyd, O. E. Semonin, M. C. Beard and A. J. Nozik, *Adv. Mater.*, 2010, 22, 3704–3707.
- [52] A. G. Pattantyus-Abraham, I. J. Kramer, A. R. Barkhouse, X. Wang, G. Konstantatos, R. Debnath, L.

- Levina, I. Raabe, M. K. Nazeeruddin, M. Grätzel and E. H. Sargent, *ACS Nano*, 2010, 4, 3374–3380.
- [53] T. Ju, R. L. Graham, G. Zhai, Y. W. Rodriguez, A. J. Breeze, L. Yang, G. B. Alers and S. A. Carter, *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 97, 043106.
- [54] Y. Liu, M. Gibbs, J. Puthussery, S. Gaik, R. Ihly, H. W. Hillhouse and M. Law, *Nano Lett.*, 2010, 10, 1960–1969.
- [55] M. V. Kovalenko, M. Scheele and D. V. Talapin, *Science*, 2009, 324, 1417–1420.
- [56] K. Szendrei, D. Jarzab, M. Yarema, M. Sytnyk, S. Pichler, J. C. Hummelen, W. Heiss and M. A. Loi, *J. Mater. Chem.*, 2010, 20, 8470–8473.
- [57] A. Cravino, P. Schilinsky and C. J. Brabec, *Adv. Funct. Mater.*, 2007, 17, 3906–3910.
- [58] M. Y. Chiu, U. S. Jeng, C. H. Su, K. S. Liang and K. H. Wei, *Adv. Mater.*, 2008, 20, 2573–2578.
- [59] Q. Dai, Y. Wang, X. Li, Y. Zhang, D. J. Pellegrino, M. Zhao, B. Zou, J. Seo, Y. Wang and W. W. Yu, *ACS Nano*, 2009, 3, 1518–1524.
- [60] G. Sarasqueta, K. R. Choudhury and F. So, *Chem. Mater.*, 2010, 22, 3496–3501.
- [61] T. Hanrath, J. J. Choi and D. M. Smilgies, *ACS Nano*, 2009, 3, 2975–2988.
- [62] D. K. Bowen and B. K. Tanner, *Nanotechnology*, 1993, 4, 175–182.

國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以 100 字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

論文： 已發表 未發表之文稿 撰寫中 無

專利： 已獲得 申請中 無

技轉： 已技轉 洽談中 無

其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以500字為限）

目前高分子太陽能電池元件製程部分，設備基本上都已經可以正常使用，會幫助高分子太陽能電池/近紅外光感測器元件的效率提升到跟國際水準一致，並且加快國內新穎高分子太陽能電池材料/奈米顆粒複合材的合成及開發，讓我們在高分子太陽能電池/近紅外光感測器元件這一領域上可以站有一席之地，為國內的綠色能源產業及太陽能產業提升到國際水準的境界。在學術論文上也預計可以協助產出更多更有潛力的研究及論文，幫助國內高分子太陽能電池/近紅外光感測器元件學術研究上取得很大的進展。

在 Near-infrared light sensor 元件部分，已發表在 *Adv. Funct. Mater.* 2010, 20, 3555–3560 和 *J. Mater. Chem.*, 2011, 21, 11605，本團隊希望未來可以和這個領域發展新穎材料方面的專家學者密切合作，發表更多高質量之 SCI 論文，而達到本關鍵核心設施平台在有效使用上之最大效益。

目前各相關實驗設備皆已設立完成，而正在進行的相關實驗亦獲致相當多的成果，因此預期未來在本計畫相關核心設施開放使用後，團隊可以和這個領域發展新穎材料方面的專家學者密切合作，發表更多高質量之 SCI 論文，而達到關鍵核心設施平台在有效使用上之最大效益。

國科會補助計畫衍生研發成果推廣資料表

日期：__年__月__日

國科會補助計畫	計畫名稱：近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料 (High Sensitivity conjugated polymer/nanoparticle Nanocomposite for Near IR Sensor Applications) 計畫主持人：韋光華 計畫編號：NSC 97-2221-E-009-006-MY3 領域：		
研發成果名稱	近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料 High Sensitivity conjugated polymer/ nanoparticle Nanocomposite for Near IR Sensor Applications		
成果歸屬機構		發明人 (創作人)	
技術說明	(中文) (200-500字)		
	(英文)		
產業別			
技術/產品應用範圍			
技術移轉可行性及預期效益			

註：本項研發成果若尚未申請專利，請勿揭露可申請專利之主要內容。

國科會補助專題研究計畫項下出席國際學術會議心得報告

日期：__年__月__日

計畫編號	NSC 97-2221-E-009-006-MY3		
計畫名稱	近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料		
出國人員姓名		服務機構及職稱	國立交通大學材料與工程學系 韋光華教授
會議時間	年 月 日至 年 月 日	會議地點	
會議名稱	(中文) (英文)		
發表論文題目	(中文) (英文)		

一、參加會議經過

二、與會心得

三、考察參觀活動(無是項活動者略)

四、建議

五、攜回資料名稱及內容

六、其他

國科會補助專題研究計畫項下赴國外(或大陸地區)出差或研習心得報告

日期：__年__月__日

計畫編號	NSC 97-2221-E-009-006-MY3		
計畫名稱	近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料		
出國人員 姓名		服務機構 及職稱	國立交通大學材料與工程學系 韋光華教授
出國時間	年 月 日至 年 月 日	出國地點	

一、國外(大陸)研究過程

二、研究成果

三、建議

四、其他

國科會補助專題研究計畫項下國際合作研究計畫國外研究報告

日期：__年__月__日

計畫編號	NSC 97-2221-E-009-006-MY3		
計畫名稱	近紅外光感測器用之高靈敏度共軛高分子/奈米顆粒複合材料		
出國人員 姓名		服務機構 及職稱	國立交通大學材料與工程學系 韋光華教授
合作國家		合作機構	
出國時間	年 月 日至 年 月 日	出國地點	

一、國際合作研究過程

二、研究成果

三、建議

四、其他