

## Сопряженный полимер на основе бензодитиофена как перспективный полупроводниковый материал для органической и гибридной электроники.

Иваненко<sup>1,7</sup> Диана Алексеевна, Лашманова<sup>2</sup> О.И., Склемина<sup>3</sup> А.В., Скорлуханова<sup>4</sup> А.В., Агапитова<sup>7</sup> М.М., Живчикова<sup>7</sup> А.Н., Теплякова<sup>6</sup> М.М., Терешенко<sup>7</sup> М.Д., Никитенко<sup>5</sup> Н.Г., Пирязев<sup>5,7</sup> А.А., Сяглова<sup>5,7</sup> Е.Д., Черняев<sup>7</sup> Д.А., Кузнецов<sup>7</sup> И.Е., Иванов<sup>5,7</sup> Д.А., Аккуратов<sup>7</sup> А.В.

- 1- Белгородский государственный национальный исследовательский университет»
- 2- Национальный исследовательский Мордовский государственный университет; МГУ им. Н.П. Огарёва
- 3- Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева
- 4- Воронежский государственный университет
- 5- МГУ им. М.В. Ломоносова
- 6- Сколковский институт науки и технологий
- 7- ФИЦ ПХФ и МХ РАН

Гибридная электроника на основе органических и неорганических материалов, привлекает все больше внимания научного и промышленного сообществ благодаря своим уникальным свойствам, включая гибкость, легкость, низкую стоимость производства и возможность создания устройств с высокой производительностью. Одним из ключевых компонентов многих устройств являются зарядово-транспортные слои, которые играют важную роль в обеспечении селективного и эффективного переноса зарядов. Такие материалы позволяют повысить как эффективность работы электроники, так и их эксплуатационную стабильность

Ранее мы синтезировали сопряженный полимер на основе блоков бензодитиофена и бис(2-тиенил)-2,5-диметоксибензола (рис.1а), который был исследован в качестве полупроводникового материала в составе гибридной солнечной ячейки. Оптоэлектронные и зарядово-транспортные свойства материала показали его высокий потенциал в качестве дырочно-транспортного слоя в органико-неорганических солнечных элементах. Устройства на основе данного материала продемонстрировали достаточно высокие характеристики: КПД – 18,4%, с напряжением холостого хода ( $V_{OC}$ ) 1020 мВ, плотностью тока короткого замыкания ( $J_{SC}$ ) 22,6 мА/см<sup>2</sup> и фактором заполнения (FF) 80%. Ключевым аспектом, определяющим такие высокие показатели эффективности, является строение молекулярного каркаса полимера, а именно планарный сопряженный скелет ввиду внутримолекулярных нековалентных взаимодействий между атомами серы и кислорода ( $S \cdots O$ ) (рис.2а). Эти взаимодействия обеспечивают высокую степень упорядоченности полимерных цепей, что положительно сказывается на эффективности переноса зарядов и, как следствие, на производительности солнечных элементов [1].

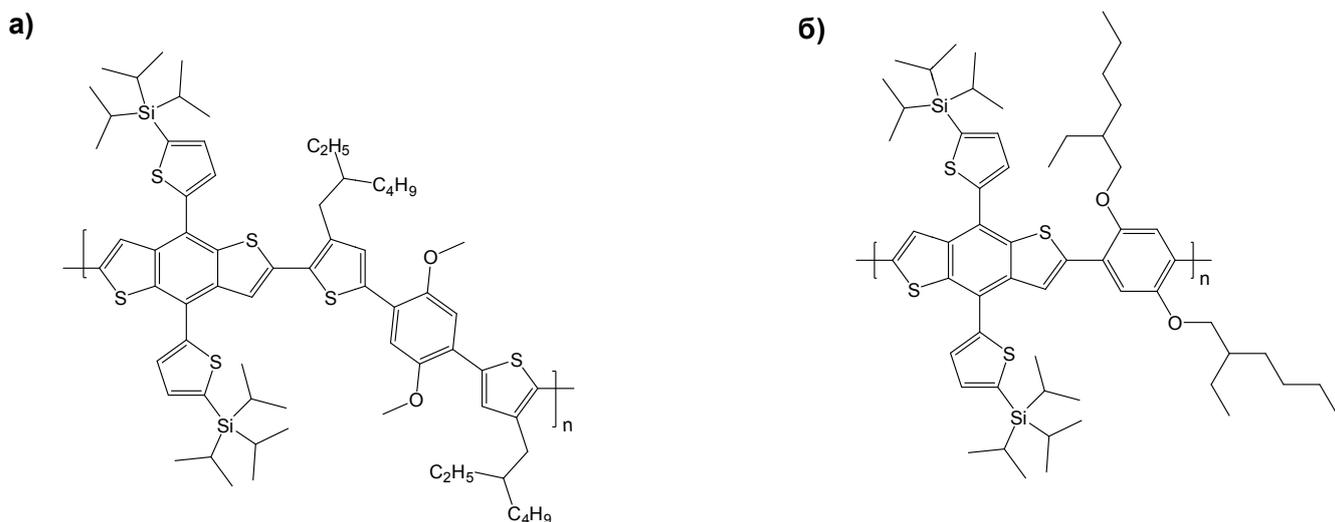


Рисунок 1. Структуры сопряженных полимеров: а) PBPh-mm; б) Lira24

В рамках данной работы мы выдвинули гипотезу, согласно которой исключение тиофеновых мостиков и перенос сольбилизирующих групп на блок диалкокситбензола позволит минимизировать скручивание полимерной цепи (рис.1б). Это приведет к усилению планаризации сопряженного скелета полимера и обеспечат более упорядоченную организацию полимерных цепей в пленках, что повысит их зарядово-транспортные свойства и, как следствие, улучшит производительность устройствах гибридной электроники с использованием данного материала.

Оптическая ширина запрещенной зоны сопряженного полимера Lira24, определенная по спектрам поглощения тонких пленок, составляет 2,19 эВ, а энергия высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО), рассчитанная на основе данных циклической вольтамперометрии, составила -5,39 эВ. Подвижность дырок, измеренная методом ТОПЗ (ток, ограниченный пространственным зарядом), достигает  $1,7 \times 10^{-3} \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ , что на порядок превышает аналогичный показатель для полимера с тиофеновымспейсером. Такое улучшение зарядово-транспортных свойств обусловлено уменьшением диэдрального угла между блоками бензодитиофена и диалкокситбензола до  $12^\circ$ , что способствует лучшей планарности полимерной цепи (рис. 2б). Это структурное изменение приводит к более эффективному транспорту носителей заряда, что подтверждает ключевую роль молекулярной архитектуры в оптимизации свойств полимерных материалов для применения в фотоэлектрических устройствах.

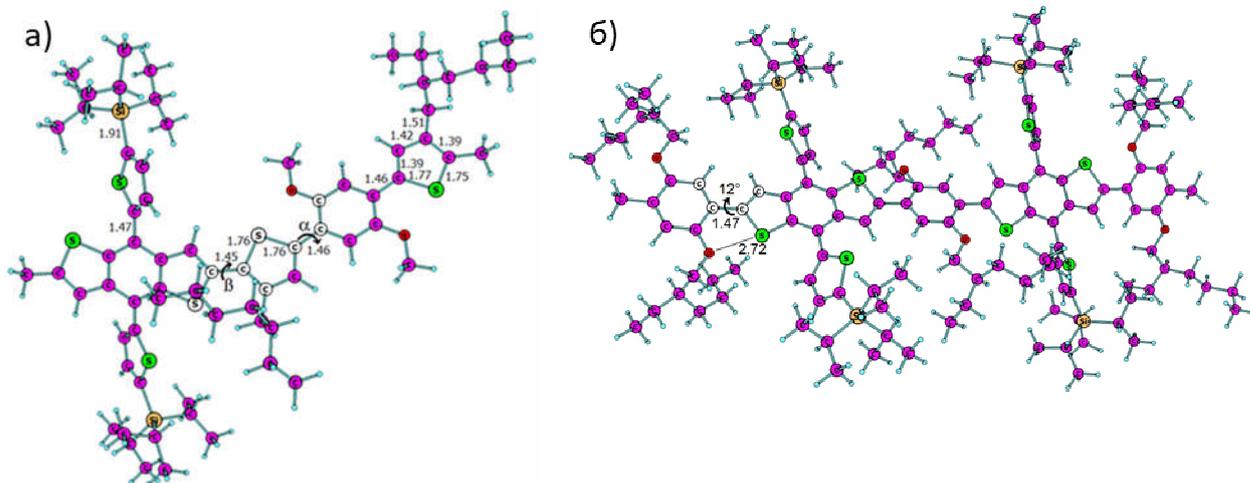


Рисунок 2. Расчеты по теории функционала плотности для сопряженных полимеров: а) PBPh-mm; б) Lira24

Применение разработанного полимера Lira24 в органо-неорганических фотопреобразователях демонстрирует позволило достичь высокую высокую эффективность, характеризуемую коэффициентом преобразования энергии фотонов в электрическую энергию 18,1%. Устройства на его основе показали напряжение холостого хода (VOC) 1040 мВ, плотность тока короткого замыкания (JSC) 22,6 мА/см<sup>2</sup> и фактор заполнения (FF) 77%.

#### **Литература**

1. D. S. Zamoretskov, A. N. Zhivchikova, I. E. Kuznetsov, M. Tepliakova, N. Nikitenko, I. A. Konushkin, M. Gapanovich, D. Chernyayev, E. Perepelitsyna, D. Sagdullina, A. V. Akkuratov. Improving photovoltaic performance of perovskite solar cells through the molecular design of donor-acceptor polymeric hole-transport materials. *J. Mater. Chem. C*, 2024,12, 16574-16582.

#### **Благодарность**

Работа выполнена в рамках государственного задания № 122111700041-8 (FFSG-2022-0004).