

Стабильность материалов для органических солнечных батарей: от методологии оценки к предсказательной модели

П. М. Кузнецов, А. Ф. Шестаков, П.А. Трошин

Органические солнечные батареи за последнее десятилетие демонстрируют стремительное развитие, достигнув сертифицированной эффективности преобразования энергии, превышающей 20% для устройств малой площади. Несмотря на эти впечатляющие результаты, несколько нерешенных проблем препятствуют широкому практическому внедрению технологии органической фотовольтаики: снижение КПД при масштабировании устройств, высокая стоимость фотоактивных материалов и, что наиболее важно, короткий срок службы. Проблема стабильности особенно сложна, поскольку она напрямую связана со свойствами материалов-поглотителей. Разработка органических солнечных элементов исторически была направлена в основном на повышение эффективности, тогда как проблеме эксплуатационной стабильности уделялось мало внимания. В результате, многие материалы, оптимизированные для получения высокой эффективности, могут не обладать внутренними свойствами, необходимыми для достижения долговременной эксплуатационной стабильности устройств, которая требуется для практического внедрения.

Обеспечение высокой стабильности органических солнечных батарей требует разработки новых органических фотоактивных материалов с высокой внутренней фотостабильностью, т.е. способных выдерживать воздействие солнечного света (включая УФ-фотоны) в течение 20-30 лет. К сожалению, в настоящее время в этой области есть лишь очень ограниченное понимание того, как внутренняя фотостабильность органических полупроводников связана с особенностями их молекулярной структуры.

В данной работе мы попытались восполнить указанный существенный пробел путем систематического исследования внутренней фотостабильности >240 сопряженных полимеров с различной молекулярной структурой. На основе анализа экспериментальных данных были введены дескрипторы стабильности для набора из >50 широко используемых структурных блоков и разработана эмпирическая модель, позволяющая количественно предсказывать степень фотодегradации сопряженных полимеров с коэффициентом корреляции Пирсона 0,91. Теоретические квантово-химические расчеты были использованы для изучения природы установленных закономерностей. Показана ключевая роль триплетных возбужденных состояний, образующихся в результате обратного переноса электрона с делокализованных состояний с переносом заряда (CT-states) и иницирующих реакции [2+2]циклоприсоединения, приводящие к фотодегradации материала.

Методология, предложенная в данной работе, может иметь революционное значение для дальнейшего развития области органической фотовольтаики. Установленные взаимосвязи между молекулярной структурой материалов и их фотостабильностью позволяют направленным образом синтезировать новые материалы с улучшенными свойствами. Таким образом, разработанный подход прокладывает путь к созданию органических солнечных батарей следующего поколения, сочетающих высокую эффективность и долговременную эксплуатационную стабильность.

Публикации:

- (1) Kuznetsov, P. M.; Komissarova, E. A.; Kuklin, S. A.; Troshin, P. A. MolecularStructure–IntrinsicPhotostabilityRelationshipsforThiophene-BenzothiadiazoleAlternating Type ConjugatedPolymers. *Mendeleev Communications*, **2024**, 34 (3), 338–341. <https://doi.org/10.1016/j.mencom.2024.04.009>.
- (2) Kuznetsov, P. M.; Martynov, I. V.; Zhidkov, I. S.; Gutsev, L. G.; Komissarova, E. A.; Maskaev, A. V.; Kukharenko, A. I.; Prudnov, F. A.; Troshin, P. A. MolecularStructure–

Intrinsic Photostability Relationships for a Series of Conjugated Polymers: Backbone Substitution Matters! *J. Phys. Chem. B*, **2023**, *127* (28), 6432–6439.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c03242>.

- (3) Kuznetsov, P. M.; Martynov, I. V.; Zhidkov, I. S.; Gutsev, L. G.; Khakina, E. A.; Zakharchenko, E. N.; Slesarenko, N. A.; Kukharenko, A. I.; Troshin, P. A. Molecular Structure – Intrinsic Photostability Relationships for Diketopyrrolopyrrole-Based Conjugated Polymers. *J. Mater. Chem. A*, **2023**, *11* (16), 9019–9028.
<https://doi.org/10.1039/D2TA09402A>. (impact factor 10.7)
- (4) Kuznetsov, P. M.; Komissarova, E. A.; Kuklin, S. A.; Khokhlova, T. N.; Novkina, P. G.; Khisamov, R. M.; Zhidkov, I. S.; Kraevaya, O. A.; Shestakov, A. F.; Troshin, P. A. Unraveling the relationship between the UV photostability of conjugated polymers and their molecular structures: triplet states matter! *Advanced Energy Materials* (impact factor 27.8), приглашенная статья в специальный выпуск, направлена в редакцию