

# ОРГАНІЧНІ ПОЛІМЕРИ НОВОГО ПОКОЛІННЯ: СТАЛІЙ РОЗВИТОК, ФУНКЦІОНАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ТА ЗАСТОСУВАННЯ

М. І. Теремінська, О. І. Ткачук, О. В. Філоненко, А. М. Дацюк

*Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України,  
вул. Олега Мудрака, 17, Київ, 03164, Україна, e-пошта: terebinska@ukr.net*

*Стаття присвячена сучасним тенденціям розвитку органічних полімерів нового покоління, зокрема їхнім функціональним властивостям, структурній інженерії та застосуванню в органічних сонячних елементах (ОСЕ). У роботі узагальнено досягнення хімії кон'югованих полімерів, донорно-акцепторних систем та вітримерних мереж, а також проаналізовано ключові фактори, що визначають ефективність, стабільність і довговічність органічних фотоелектричних пристроїв. Значну увагу приділено сучасним підходам до створення полімерів зі зниженими енергетичними втратами, високою рухливістю носіїв заряду та розширеним спектром поглинання у видимому й ближньому інфрачервоному діапазонах. Окремо розглянуто фактори, які обумовили стрімке зростання ефективності ОСЕ до понад 19% упродовж останнього десятиліття, включно з розвитком нефулеренових акцепторів серії ІТІС та Y6/Y7, появою високопродуктивних донорних полімерів (PM6, D18), а також оптимізацією морфології активного шару на нанорівні.*

*У статті надано розгорнутий огляд донорних і акцепторних полімерів, їхньої еволюції, енергетичних характеристик, спектральних властивостей і особливостей взаємодії в об'ємних гетеропереходах. Значна частина роботи присвячена полімерним акцепторам нового покоління, які забезпечують можливість створення повністю полімерних сонячних елементів (all-PSC). Детально описано структурні типи полімерних акцепторів (NDI-, PDI-, BTI- та поліімідні системи), їхні енергетичні рівні, кон'югацію, здатність формувати впорядковані домени та вплив на параметри фотоелектричного перетворення. Розглянуто ключові морфологічні параметри активного шару, включно з фазовим розділенням,  $\pi$ - $\pi$  стекингом, орієнтацією ланцюгів і транспортними шляхами носіїв заряду, а також наведено сучасні методи керування наноструктурою: SVA, оптимізацію розчинників, модифікацію бокових ланцюгів полімерів, послідовне нанесення та використання добавок.*

*Окремо проаналізовано процеси деградації та фактори, що обмежують довговічність ОСЕ: фотоокиснення, термічну деструкцію, морфологічну еволюцію, деградацію контактів та вплив кисню й вологи. Розглянуто фізичні моделі, що описують деградацію (рівняння Арреніуса, Флорі–Гагінса, кінетику рекомбінації), а також показано, як хімічні модифікації полімерів (фторування, селенізація, введення електроннодефіцитних груп), інженерія інтерфейсів і застосування бар'єрних інкапсуляційних технологій дозволяють суттєво підвищити стабільність пристроїв. Наведено сучасні стратегії підвищення довговічності, включно зі створенням вітримерних і самовідновлюваних мереж, впровадженням буферних оксидних шарів, розробкою багатошарових бар'єрних структур та використанням алгоритмів машинного навчання для прогнозування деградації.*

*Таким чином, стаття представляє комплексний огляд сучасних полімерних матеріалів для органічної електроніки та фотогальваніки, демонструючи, що системна оптимізація молекулярної структури, морфології, інтерфейсів і захисних бар'єрів*

*створює підґрунтя для переходу органічних сонячних елементів від лабораторних зразків до практичних, комерційно конкурентоспроможних технологій. Робота окреслює основні наукові виклики галузі та перспективні напрями подальших досліджень, пов'язані зі зростанням ефективності понад 20%, суттєвим покращенням стабільності та впровадженням органічних полімерів нового покоління у промислові енергетичні застосування.*

**Ключові слова:** *органічні сонячні елементи, органічні полімери, сонячна енергетика, кон'юговані полімери, донорно-акцепторні полімери, вітримери.*

## **ВСТУП**

Органічні полімери є однією з найдинамічніших і найперспективніших галузей сучасної матеріалознавчої науки. Завдяки унікальному поєднанню структурної різноманітності, легкості хімічної модифікації та можливостей масштабного виробництва, вони вже понад півстоліття залишаються основою чистених технологічних рішень – від побутових пластмас і текстильних волокон до медичних імплантів та елементів органічної електроніки. Проте останні десятиліття характеризуються істотним зсувом дослідницьких пріоритетів: на перший план виходять проблеми сталого розвитку, біосумісності та створення функціональних «розумних» матеріалів [1, 2].

Сучасна наука про полімери перебуває на перехресті кількох глобальних викликів. По-перше, гостро стоїть екологічна проблема надмірного накопичення традиційних полімерних відходів, що стимулює розвиток біорозкладних і біоорієнтованих матеріалів [1]. По-друге, актуальним є питання рециклу та повторюваного використання термореактивних полімерів, яке частково вирішується завдяки появі концепції вітримерів і ковалентно-адаптивних мереж [3, 4]. По-третє, органічні кон'юговані полімери відкривають нові горизонти для електроніки, фотоніки та енергетики, забезпечують гнучкість, легкість і можливість низькотемпературного виробництва [5, 6].

Особливої уваги останніми роками набули органічні полімери в контексті сонячної енергетики. Так звані органічні сонячні елементи (organic solar cells, OSCs), що базуються на кон'югованих полімерних донорах та акцепторах, демонструють стрімке зростання ефективності, яка вже перевищує 19% [7]. Їхні ключові переваги – можливість виготовлення на гнучких підкладках, низька енергоємність виробництва та сумісність із технологіями друку, що відкриває перспективи для створення легких, прозорих і недорогих фотоелектричних пристроїв [8]. Важливими є й фундаментальні дослідження спрямовані на оптимізацію морфології активних шарів, стабільності матеріалів та їхнього масштабного застосування [9]. Нарешті, бурхливо розвивається напрям «розумних» та самовідновлюваних полімерів, здатних реагувати на зовнішні стимули та адаптуватися до змінних умов експлуатації [10, 11].

В останні роки у провідних наукових журналах опубліковано низку ґрунтовних оглядів та експериментальних робіт, які значною мірою змінили уявлення про можливості органічних полімерів [5, 12]. З'явилися нові методи синтезу та модифікації макромолекул, поглибилися підходи до дослідження структури й динаміки полімерних мереж, запропоновано шляхи комбінації полімерів з наноструктурованими матеріалами. Це визначає потребу в систематизації наявних знань та критичному аналізі сучасних тенденцій розвитку галузі.

Метою цієї статті є узагальнення й аналіз основних досягнень у сфері органічних полімерів за останні роки. Свою увагу будемо звертати на:

кон'юговані полімери та їхні застосування в органічній електроніці та енергетиці, полімери з динамічними зв'язками, «розумні» та самовідновлювані системи, сучасні методи дослідження й характеристики полімерних структур. Будемо намагатись окреслити

актуальні проблеми та перспективи, які визначатимуть подальший розвиток полімерної науки і технологій у найближчі десятиліття.

### **КОН'ЮГОВАНІ ПОЛІМЕРИ ТА ОРГАНІЧНА ЕЛЕКТРОНІКА**

Органічні кон'юговані полімери завдяки наявності системи делокалізованих  $\pi$ -електронів проявляють надпровідникові властивості, що робить їх базовими матеріалами для сучасної органічної електроніки [13, 14]. На відміну від традиційних неорганічних напівпровідників, ці матеріали відзначаються гнучкістю, низькою щільністю, можливістю обробки з розчинів і сумісністю з технологіями друку. Це забезпечує потенціал для створення недорогих, легких і гнучких електронних пристроїв нового покоління – від транзисторів і сенсорів до світлодіодів та сонячних елементів [15].

#### ***Органічні сонячні елементи***

За останнє десятиліття органічні сонячні елементи зробили значний прорив: показник ефективності перетворення енергії (PCE) (ККД) зріс із 10–12% до понад 19% завдяки розвитку нових донорно-акцепторних систем та контролю морфології активного шару [16, 17]. Ключовими чинниками підвищення ефективності стали:

- синтез нових кон'югованих полімерних-донорів із вузькою забороненою зоною та високою рухливістю носіїв [14];
- застосування нефулеренових акцепторів (NFAs), які забезпечили оптимальні енергетичні рівні й поліпшену стабільність [18];
- контроль мікро- та наноморфології активного шару за допомогою розчинників, адитивів постобробки [15];
- впровадження багат шарових та тандемних архітектур, які дозволяють максимально використати спектр сонячного випромінювання [19].

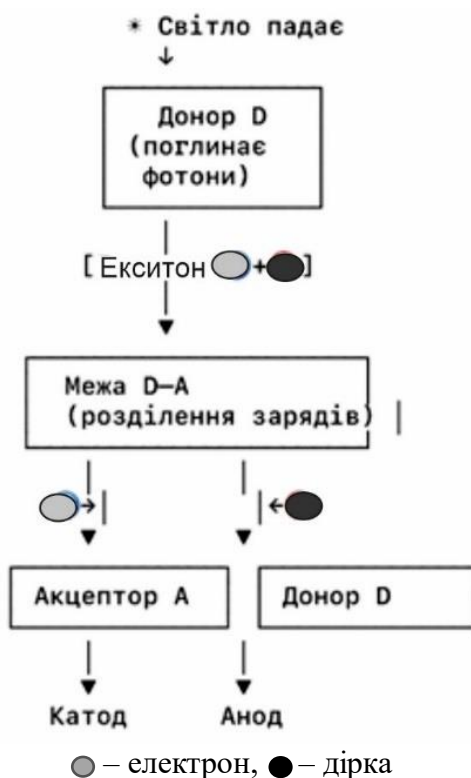
Окрім зростання ефективності, важливою тенденцією є покращення стабільності OSCs. Сучасні дослідження зосереджуються на зменшенні деградації при впливі кисню, вологи та ультрафіолетового випромінювання [16, 17]. Активно розробляються інкапсуляційні технології та полімери зі стійкішими хімічними зв'язками, що відкриває шлях до практичної комерціалізації [20].

Не менш перспективним напрямком є інтеграція OSCs у гнучкі та напівпрозорі пристрої, які можна використовувати у вікнах, фасадах будівель та портативній електроніці [18, 21–23]. Поєднання високої ефективності, механічної гнучкості та низьковартісного виробництва робить органічні сонячні елементи важливим кандидатом у сфері відновлюваної енергетики.

#### ***Донорно-акцепторні полімери для органічних сонячних елементів***

У сучасних органічних та гібридних сонячних елементах концепція донор-акцептор є ключовою для ефективного перетворення світлової енергії на електричну. Для ролі донора має бути матеріал із високою здатністю до поглинання фотонів та генерації екситонів. Такий матеріал має мати низький потенціал віддачі електронів і володіти високою рухливістю дірок. Як акцептор може слугувати матеріал, який здатний ефективно приймати електрони від донора, сприяючи розділенню екситонів на вільні носії заряду. Нижче наведено схему донорно-акцепторного сонячного елемента.

Світло взаємодіючи з донорною областю, генерує екситони – зв'язані пари електрон-дірка. Далі відбувається дифузія екситонів до межі донор-акцептор, на цій межі електрон переходить від донора до акцептора відбувається розділення зарядів, а дірка в свою чергу залишається в донорі, формуючи вільні носії зарядів. Далі електрони рухаються до катоду через акцептор, а дірки – до аноду через донор, створюючи електричний струм у зовнішньому колі (див. Рис. 1).

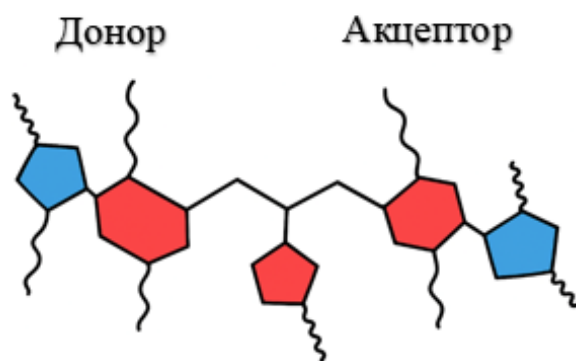


**Рис. 1.** Схема донорно-акцепторного сонячного елемента

### *Донорні полімери*

Донорні полімери є основними компонентами активного шару органічних сонячних елементів (OSCs), відповідаючи за поглинання світла, генерацію та перенесення носіїв заряду [13]. Найбільш поширені системи базуються на кон'югованих полімерних ланцюгах, які забезпечують переміщення електронів та гнучкість при формуванні плівок [9].

Сучасні OSCs здебільшого використовують донорно-акцепторні полімери, що поєднують в одному ланцюзі сегменти донорів та акцепторів (див. Рис. 2). Така архітектура дозволяє точно контролювати ширину забороненої зони та енергетичні рівні, підвищуючи коефіцієнт фотогенерації [10].



**Рис. 2.** Морфологія активного шару OSCs

Особливу увагу приділяють розчинним полімерним системам, що дозволяють наносити активний шар методами друку або напилення, відкриваючи шлях до гнучкості та великих модулів. Структурні модифікації бічних ланцюгів полімерів дозволяють контролювати морфологію плівки, взаємодію з акцептором та стабільність пристрою.

Перші донорні матеріали були з тіофеновими або фенільними повторюваними одиницями, які мали достатній рівень поглинання світла та утворення екситонів. Поступово були розроблені нові покоління полімерів з більш широким спектром поглинання та кращою електронною мобільністю. Наприклад, полімери PBDB-T, PM6 та PTB7-Th демонструють високу ефективність у поєднанні з нефулереновими акцепторами, забезпечуючи перетворення потужності елемента (ПЕЕ, ККД) понад 17–19% [11, 12]. В Табл. 1 наведено найбільш поширені донорні полімери (див. Рис. 3).

**Таблиця 1.** Основні донорні полімери для OSCs та їхні властивості

Полімер	Ширина забороненої зони (eV)	Поглинання (нм)	ПЕЕ (ККД), (%)	Особливості
<b>P3HT</b> (Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl))	1.9	400–600	4–6	Класичний полімер; легка обробка; низька ефективність, [24, 25]
<b>PBDB-T</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-di-2-thienyl-5',7'-bis(2-ethylhexyl)benzo[1',2'-c:4',5'-c']dithiophene-4,8-dione))])	1.82	450–700	16–17	Добра сумісність з NFA, [23, 26]
<b>PM6</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-butylloctyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-di-2-thienyl-5',7'-bis(2-butylloctyl)benzo[1',2'-c:4',5'-c']dithiophene-4,8-dione))])	1.75	500–750	17–18	Висока стабільність при термопроцесах, [24, 27]
<b>PTB7-Th</b> (Poly[4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-alt-3-fluorothiopheno[3,4-b]thiophene-2-carboxylate])	1.65	400–720	17–18	Широкий спектр поглинання, гнучкі бічні ланцюги, [24]
<b>PBDB-T-SF</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-bis(5-methylthiophen-2-yl)-[1,1'-biphenyl]-4,4'-dione))])	1.8	450-730	17-18	Сірко-фтор модифікація; кращий контроль морфології, [17]
<b>PBDB-TF</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-bis(5-fluorothiophen-2-yl)-[1,1'-biphenyl]-4,4'-dione))])	1.8	460–740	16–17	Фторований аналог; покращена стабільність, [28]
<b>PTQ10</b> (Poly[2,5-bis(2-hexyldecyloxy)phenylene-alt-5,6-difluoro-4,7-di(thiophen-2-yl)benzo[c][1,2,5]thiadiazole])	1.9	450–700	16–17	Універсальний донор із різними акцепторами, [29]
<b>D18</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(5,8-bis(2-ethylhexyl)benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene-4,8-dione))])	1.82	450-800	18-19	Один із найуспішніших донорів у поєднанні з NFA (Y-серія), [26]
<b>PBT1-C</b> (Poly[2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-5,5'-(5,6-difluoro-2,1,3-benzothiadiazole)])	1.7	500–780	16–17	Тонке налаштування енергетичних рівнів; хороша сумісність, [30]
<b>PBDT-TS1</b> (Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-bis(5-methylthiophen-2-yl)benzo[1,2-c:4,5-c']thiadiazole))])	1.8	450–740	15–16	Покращене перенесення заряду; збалансовані енергетичні рівні, [31]

## Розвиток донорних полімерів у OSCs



Рис. 3. Схема розвитку донорних полімерів

Сучасні дослідження також звертають увагу на широкозонні донори, які підвищують поглинання у видимій та ближній інфрачервоній ділянках спектра, що дозволяє отримати OSCs із покращеною генерацією фотоструму та більшою стабільністю.

Першим і найпоширенішим донорним полімером став P3HT. Його застосування у сонячних елементах було продемонстровано ще на початку 2000-х. Цей матеріал приваблював простою структурою, дешевизною та технологічністю у розчинній обробці [24]. Проте відносно широка заборонена зона (1.9 eV), вузький спектр поглинання (до 600nm) і низька ефективність (5%) обмежили подальший прогрес. Саме ці недоліки стимулювали пошук нових матеріалів із кращими спектральними характеристиками та підвищеною рухливістю носіїв.

Наступним кроком стало створення PTB7 та його модифікації PTB7-Th, які завдяки введенню тіофевих і фторованих замісників змогли значно розширити спектр поглинання до 720 nm та знизити енергетичний розрив [27]. Ці полімери дозволили підняти ККД до 17–18%, однак їхнім недоліком стала складність у відтворенні морфології плівок, що ускладнювало масштабування виробництва.

Для вирішення цих проблем була розроблена серія PBDB-T. Завдяки донорно-акцепторній архітектурі вона забезпечила краще узгодження енергетичних рівнів та стабільнішу морфологію активного шару [22, 25]. Проте початкові варіанти мали обмежене поглинання у ближній ІЧ-області, що стимулювало появу модифікацій, зокрема PBDN-T-SF та PBDB-TF, у яких введення фтору та сірки дало змогу збільшити поглинання та підвищити стабільність [17, 28].

Подальший розвиток привів до створення PM6, який можна вважати стандартом серед донорних полімерів останніх років. Він продемонстрував високу ефективність (17–18%), покращену сумісність із нефулереновими акцепторами та хорошу термічну стабільність [23, 26]. Саме PM6 зробив можливим досягнення рекордного ККД у поєднанні з акцепторами серії Y.

Паралельно було запропоновано D18, який став ще одним ключовим донором нового покоління. Його головною перевагою є винятково широкий спектр поглинання (до 800 nm) і здатність забезпечувати ККД понад 18% [26]. Це зробило його одним із найбільш досліджуваних матеріалів у сучасних OSCs.

Серед альтернативних рішень варто згадати PTQ10, PBT1-C та PBDT-TS1, які з'явилися як спроби спростити синтез, здешевити виробництво та забезпечити контрольовані енергетичні рівні [29–31]. Вони демонструють хорошу сумісність із різними акцепторами, проте поки що не змогли перевершити ефективність PM6 та D18.

Таким чином, розвиток донорних полімерів від РЗНТ до сучасних PM6 та D18 ілюструє загальну еволюцію галузі: від простих і дешевих матеріалів із низькою ефективністю – до складних, хімічно оптимізованих структур, які забезпечують високий рівень ККД, стабільність та перспективу масштабного використання в промисловості.

#### **Акцепторні матеріали та їх похідні**

Ефективність (ОСЕ) значною мірою визначається збалансованістю системи «донор-акцептор». Якщо донорний полімер відповідає за поглинання світла та генерацію збуджених станів (екситонів), то акцептор виконує ключові функції – приймає електрони та сприяє розділенню носіїв заряду на межі поділу фаз [19, 22]. Таким чином, якість і властивості акцепторних матеріалів безпосередньо впливають на параметри  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$  і, зрештою, на загальну ефективність перетворення енергії, тобто ККД. Розвиток акцепторних матеріалів для ОСЕ можна умовно поділити на три етапи. Так, перше покоління акцепторів – це фулерени та їх похідні, друге – нефулеренові акцептори, які забезпечили прорив в ефективності, та найновіші – полімерні акцептори, що дозволяють створювати повністю полімерні сонячні елементи Рис. 4.



**Рис. 4.** Схема розвитку акцепторних матеріалів

Ідеальний акцептор повинен мати:

- високу електронну рухливість;
- оптимальні енергетичні рівні для сприятливого перенесення заряду;
- широкий спектр поглинання у видимій та ближній ІЧ-областях;
- морфологічну сумісність із донорним полімером;
- достатню хімічну і термічну стабільність [29, 31].

#### **Фулерени та їх похідні**

Фулерени стали першими акцепторними матеріалами, що широко застосовуються в органічних сонячних елементах. Найбільш відомими є PC61BM та PC71BM, які використовувалися у поєднанні з донорними полімерними матеріалами, зокрема РЗНТ [29]. Їхня поява у 1990-х роках ознаменувала початок ери об'ємних гетероперехідних (ОГП) архітектур, що дозволили значно підвищити ефективність фотоперетворення порівняно з попередніми шаруватими структурами [19]. Основними перевагами фулеренових акцепторів стали:

- висока електронна рухливість, що забезпечує ефективний транспорт заряду;
- здатність до утворення стабільних нанофазових доменів із полімерними донорами;
- достатня термічна стабільність і відтворюваність результатів [20].

Проте з часом стали очевидними і недоліки фулеренових акцепторів:

- слабе поглинання у видимому та ближньому ІЧ-діапазоні;
- складність регулювання енергетичних рівнів;
- низьке відкрите напруження контуру ( $V_{oc}$ ), що обмежувало ефективність;

- фотохімічна нестабільність при тривалій роботі [14, 15].

Попри ці обмеження, фулеренові матеріали (PCBM та його похідні) відіграли фундаментальну роль у розвитку ОСЕ, оскільки саме з ними вперше було досягнуто ККД на рівні 3–8%, що на початку 2000-х років вважалося проривом. Наприклад, використання PC71BM як акцептора дало змогу значно розширити спектр поглинання і підняти ККД понад 6% [30]. В Табл. 2 наведено ключові фулеренові акцептори, які реально застосовувались в ОСЕ.

**Таблиця 2.** Основні фулеренові акцептори для ОСЕ

Скорочена назва	Повна назва	Оптична заборонена зона (eV)	ККД (%)
PC61BM	[6,6]-Phenyl-C61-butyric acid methyl ester	~2.0	3-5
PC71BM	6,6]-Phenyl-C71-butyric acid methyl ester PC71BM	~1.9	6-8
ICBA	Indene-C60 bisadduct	~2.1	6-7
ThCBM	Thienyl-C61-butyric acid methyl ester	~2.0	5-6

PC61BM – перший і найбільш поширений акцептор, який застосовувався в поєднанні з РЗНТ та іншими донорами. Забезпечив фундаментальний прорив в ОГП структурах [24]. Проте мав обмежене поглинання у видимому діапазоні та низьке  $V_{oc}$ .

PC71BM – модифікація на основі  $C_{70}$ , що характеризується ширшим спектром поглинання, особливо у видимій області. Це дозволило збільшити  $J_{sc}$  і підняти ефективність ОСЕ до 6–8% [30]. Однак проблема низької стабільності залишалася.

ICBA – похідне фулерену з підвищеним рівнем LUMO, що сприяло збільшенню  $V_{oc}$  і покращенню ефективності до ~7% [19]. Недоліком стала складність контролю морфології активного шару.

ThCBM – модифікація PCBM з тієнільними групами. Продемонстрував дещо покращене поглинання та морфологічну сумісність із деякими донорами, проте не зміг забезпечити суттєвого зростання ККД (до 6%) [29].

Подальші спроби модифікації фулеренів були спрямовані на поліпшення їхніх оптичних і електронних характеристик, однак досягнуті результати виявилися недостатніми для подолання фундаментальних обмежень. Саме це стимулювало пошук альтернативних акцепторів – нефулеренових систем, що згодом забезпечили різкий стрибок ефективності ОСЕ [22].

Фулеренові акцептори відіграли ключову роль у формуванні ОСЕ, однак їхні структурні обмеження (вузьке поглинання, складність регулювання енергетичних рівнів, фотонестабільність) не дозволили подолати межу ~8–9% ККД. Це і стало поштовхом до розробки нефулеренових акцепторів нового покоління.

### **Нефулеренові акцептори (NFAs)**

Пошук альтернатив фулереновим похідним привів до створення нового класу матеріалів – нефулеренових акцепторів, який нині є провідним напрямком у розвитку ОСЕ. Основна ідея їхнього використання полягала у подоланні фундаментальних обмежень фулеренів [22, 29].

Ключовою особливістю NFAs є їхня молекулярна архітектура типу «донор-акцептор» або «акцептор-донор-акцептор». У таких структурах центральний донорний блок поєднаний із сильно електроннодефіцитними акцепторними фрагментами. Це дозволяє:

- цілеспрямовано налаштувати положення HOMO та LUMO рівнів;
- розширювати спектр поглинання у видимій та ближніх ІЧ-областях;
- контролювати морфологію активного шару завдяки планарним, добре впорядкованим молекулярним структурам;
- суттєво підвищувати  $V_{oc}$  та  $J_{sc}$  у порівнянні з фулеренами [30, 31].

Першим поколінням NFAs (див. Табл. 3) стали молекули серії ІТІС, які у поєднанні з полімерними донорами (PBDB-T) забезпечили підвищення ефективності ОСЕ до 11–13% [22]. Подальший прорив відбувся із впровадженням молекул серії Y (2019 рік), які завдяки оптимізованій «акцептор-донор-акцептор» архітектурі й сильному поглинанню в ближньому ІЧ-діапазоні дозволили перевищити ефективність 18–19% [18, 30].

Таким чином, нефулеренові акцептори стали визначальним фактором сучасного розвитку органічної фотогальваніки. Вони забезпечили перехід від фулеренових систем до гнучкої платформи молекулярного дизайну, відкривши шлях до створення високоефективних і стабільних ОСЕ.

**Таблиця 3.** Основні нефулеренові акцептори для органічних елементів

Назва	Оптична заборонена зона (eV)	ККД (%)	Особливості
<b>ІТІС</b> (3,9-bis(2-methylene-(3-(1,1-dicyanomethylene)-indanone))-5,5,11,11-tetrakis(4-hexylphenyl)-dithieno[2,3-d:2',3'-d']-s-indaceno[1,2-b:5,6-b']dithiophene)	1.6	11–13	2015, використовувався як перший NFS матеріал, за його допомогою змогли підвищити ККД вище 10% [22]
<b>ІТІС-Th</b> (сульфур-заміщений похідний ІТІС)	1.6	13–14	2016, використання даного матеріалу дало змогу оптимізувати енергетичні рівні, та покращити морфологію [29]
<b>Y6</b> (2,2'-((2Z,2'Z)-((12,13-bis(2-ethylhexyl)-3,9-diundecyl-12,13-dihydro-[1,2,5]thiadiazolo[3,4-e]thieno[2'',3'':4',5']thieno[2',3':4,5]pyrrolo[3,2-g]thieno[2'',3'':4',5']thieno[3,2-b]indole-2,10-diyl)bis(methanylylidene))bis(5,6-difluoro-3-oxo-2,3-dihydro-1H-indene-2,1-diylidene))dimalononitrile)	1.33	15–18	2019, його використання стало проривом завдяки сильному поглинанню в ближньому ІЧ-діапазоні та ефективному перенесенню зарядів [18]
<b>Y7</b> (похідне Y6 з модифікованими кінцевими групами)	1.26	17–19	2020, завдяки використанню цього матеріалу стало можливим знизити оптичну заборонену зону [30]
<b>ВТР-eC9</b> (варіант Y6 з розширеним спектром поглинання)	1.3	18–19.5	2021, вважають базою для наступного покоління ОСЕ [31]

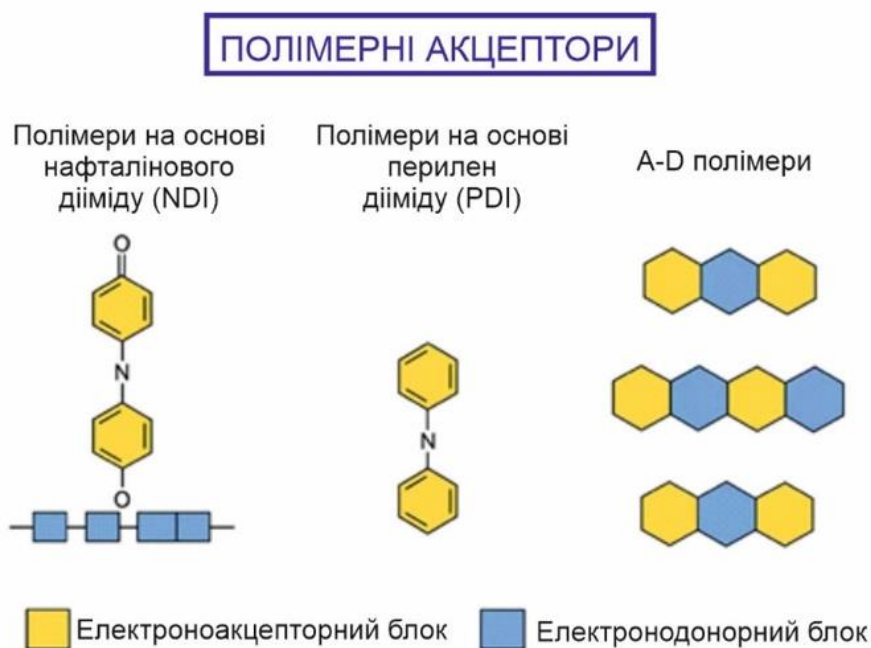
### Полімерні акцептори

Полімерні акцептори є ключовим підкласом n-типних органічних напівпровідників, здатних ефективно приймати електрони від донорних полімерів і формувати *об'ємні гетероструктури* (ВНІ) у складі сонячних елементів. Їхня поява стала основою для створення *повністю полімерних сонячних елементів (all-PSCs)*, де обидві складові активного шару – донор і акцептор – мають полімерну природу. Вони базуються на електронодефіцитних ядрах (переважно діїмідах або поліїмідах), які знижують енергетичний рівень LUMO та підвищують електронну спорідненість [32]. Це дозволило отримати матеріали з покращеною механічною стабільністю, довговічністю та процесуальною сумісністю порівняно з молекулярними нефулереновими акцепторами.

На відміну від фулеренів та більшості класичних NFAs, головна перевага полімерних акцепторів – структурна варіативність і регульованість властивостей. Завдяки можливості модифікувати центральні фрагменти (ядра), донорні ланцюги або бічні замітники, можна

точно налаштувати оптичну заборонену зону, електронну мобільність, ступінь кристалічності та морфологію плівки [33].

У більшості таких полімерів електронодифіцитне ядро поєднується з помірно донорними співмономерами (тіофен, бензодіоксотіофен, бензотіазол), що утворюють донорно-акцепторну (D-A) архітектуру полімерного ланцюга див. Рис. 5. Ця структурна концепція сприяє подовженню  $\pi$ -кон'югації, зменшенню енергетичного розриву ( $E_g$ ) і покращенню поглинання у видимій та ближній ІЧ – областях [34].



**Рис. 5.** Схематичне зображення основних типів полімерних акцепторів

### *Класи полімерних акцепторів*

**1. Нафталендіїміди (NDI)** – перші ефективні полімерні акцептори, які поєднують жорстку планарну  $\pi$ -систему з високою електронною спорідненістю. Найвідоміший представник – **P(NDI2OD-T2)** або **N2200**, синтезований у 2011 році [35].

Даний полімер представляє собою чергування NDI та бітіофенових ланок, має  $E_g \approx 1.7$  eВ, LUMO  $\approx -4.0$  eВ, HOMO  $\approx -5.8$  eВ, ККД у комбінації з РЗНТ  $\approx 6-8\%$ , електронна мобільність до  $10^{-2}$   $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  [36].

Переваги NDI-полімерів – висока стабільність, хороша розчинність, контроль морфології, але спектр їх поглинання обмежений у ділянці  $< 700$  нм, що і зумовлює низький ККД. Щоб це виправити, синтезували флуоровані NDI, або варіанти з розширеними донорними блоками (наприклад, з тіснотіофеном чи бензотіазолом) [37].

**2. PDI-базовані полімери (перилена-3,4,9,10-діїміди).** Перинендіїміди мають більш розвинену  $\pi$ -систему, що зумовлює ширше поглинання (до 750 нм) та рівень LUMO  $\approx -4.1$  eВ середній ККД у комбінації з РМ6  $\approx 9.3\%$ , [38]. Типові представники – P(PDI-DTT), PDI-VT, F-PDI, які поєднують PDI фрагменти з різними донорними співмономерами.

Недолік PDI-полімерів полягає у схильності до агрегації, що призводить до великомасштабного фазового розділення у ВНІ. Однак введення стеричних замісників і флуорованих атомів значно покращує морфологічну сумісність із донорами [39].

**3. Полііміди та інші діїміди.** Полііміди (PI) та споріднені діїміди поєднують високу хімічну та термічну стабільність ( $T > 250^\circ\text{C}$ ) із добрими електронно-транспортними характеристиками. Вони часто використовуються у кополімерних архітектурах, де варіювання донорних фрагментів (наприклад, тіофен, флуорований бензотіазол) дозволяє збалансувати перенесення заряду й розширити спектр поглинання [40].

**4. Донорно-акцепторні кополімери нового покоління.** Новітні полімерні акцептори розробляються за принципом A-D або D-A-D архітектури, що наслідують концепцію нефулеренових акцепторів (наприклад, Y6). У таких матеріалах центральні електронодефіцитні ядра (NDI, INDI, BTI) з'єднані з донорними сегментами, які регулюють електронну густину та  $\pi$ -кон'югацію.

Це дозволяє досягати розширеного спектра поглинання (до 900 нм) і ефективності до 17% у *all-PSC* [41].

У Табл. 4 наведено основні класи полімерних акцепторів та їх характеристики.

**Таблиця 4.** Основні класи полімерних акцепторів для *all-PSC*

№	Клас полімерних акцепторів	Типовий приклад	E <sub>g</sub> (eV)	ККД (%)	Рік синтезу
1	NDI-базовані	P(NDI2OD-T2) (N2200)	1.7	6-8	2011
2	Флуоровані NDI	F-P(NDI-T2)	1.65	8-10	2016
3	PDI-базовані	P(PDI-DTT)	1.6	9.3	2018
4	Полііміди	PI-BT	1.55	10.7	2019
5	Донорно-акцепторні кополімери нового покоління	P(NDI-BTI)	1.45	15-17	2023

#### **Оптичні, електронні та морфологічні властивості полімерних акцепторів**

Фізико-хімічні властивості полімерних акцепторів безпосередньо визначають ефективність та стабільність ОСЕ. На відміну від фулеренів і мономерних нефулеренових акцепторів, ці матеріали демонструють вищу стабільність енергетичних рівнів, керовану морфологію та збалансоване транспортування зарядів [42].

#### **Оптичні властивості**

Поглинання світла полімерними акцепторами охоплює широкий спектр від 400 до 900 нм, що забезпечує значне перекриття із сонячним випромінюванням (ультрафіолетове (від 10 до 400 нм), видиме світло (від 400 до 750 нм) та інфрачервоне (від 750 нм до 1 мм)). NDI-базовані матеріали, такі як N2200, мають максимум поглинання в межах 670–710 нм, тоді як PDI- та BTI – кополімери зміщують його до 750–850 нм завдяки збільшеній площі  $\pi$ -кон'югації [43].

Розширення діапазону поглинання досягається:

- введенням донорно-акцепторних мономерів (A-D, D-A-D архітектури);
- флуоруванням кон'югованого ланцюга, яке знижує енергетичний рівень LUMO та посилює  $\pi$ - $\pi$  взаємодії;
- подовженням бокових ланцюгів, що впливає на планарність полімеру та зсув спектра в бік довших хвиль.

Для нових A-D кополімерів на основі BTI та INDI поглинання охоплює до 880-900 нм, що наближає їх до властивостей матеріалів Y6 серії [44].

#### **Енергетичні рівні та електронна мобільність**

Енергетичні рівні полімерних акцепторів визначаються як баланс між HOMO і LUMO.

Для високої ефективності у *all-PSC* критичним є поєднання з донорними полімерними матеріалами, зокрема PM6 або D18, щоб забезпечити достатню різницю LUMO  $\approx$  0.3 eV і уникнути надмірних енергетичних втрат [45]. У Табл. 5 наведено енергетичні значення основних полімерних акцепторів.

Висока електронна мобільність ( $\mu_e \approx 10^{-2} \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) забезпечує ефективне транспортування заряду і зменшує втрати при рекомбінації [42]. Підвищення  $\mu_e$  досягається завдяки флуоруванню, подовженню кон'югації, а також збільшенню планарності полімерного ланцюга [45].

**Таблиця 5.** Основні характеристики деяких полімерних акцепторів

Матеріал	НОМО (eV)	LUMO (eV)	E <sub>g</sub> (eV)	μ <sub>e</sub> (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	Джерело
N2200	-5.8	-4.0	1.7	2×10 <sup>-3</sup>	[35]
F-NDI-T2	-5.9	-4.1	1.65	4×10 <sup>-3</sup>	[37]
P(PDI-DTT)	-5.7	-4.1	1.6	1×10 <sup>-2</sup>	[38]
PI-BT	-5.6	-4.2	1.55	3×10 <sup>-3</sup>	[40]
P(NDI-BTI)	-5.5	-4.05	1.45	5×10 <sup>-3</sup>	[41]

### **Морфологічна організація**

Морфологія активного шару є критичною для досягнення високої ефективності. Полімерні акцептори формують ко-кристалічні домени з донорними полімерними ланцюгами, що сприяє ефективному розділенню екситонів і транспортуванню носіїв заряду.

Оптимальна морфологія досягається:

- контролем розчинності та вибору розчинників (хлорбензен, DIO – добавки);
- термічним відпалом (110–130°C) для орієнтації π-π стекінгу;
- використанням полярних добавок, які регулюють фазове розділення між донором та акцептором [46].

Високоєфективні плівки демонструють упорядковані домени розміром 15–25 нм із вертикальною орієнтацією π-π стеків, що підтверджується методами GIWAXS (розсіювання рентгенівських променів під малим кутом при ковзному падінні) та AFM (атомно силова мікроскопія) [47].

### **Вплив властивостей на ефективність пристроїв**

Ефективність перетворення енергії (ККД) у *all-PSC* значною мірою визначається взаємозв'язком між E<sub>g</sub>, μ<sub>e</sub> та морфологічною впорядкованістю. NDI-базовані полімери мають нижчий V<sub>oc</sub>(~0.85 В) тоді як А-D кополімери демонструють підвищений V<sub>oc</sub>(~1.0 В) завдяки оптимізованим енергетичним рівням [41]. Поєднання кополімерів типу P(NDI-BTI) з донорами PM6/D18 дало змогу досягти ККД понад 17%, що є рекордним для полімерних акцепторів [41, 46]

Оптичні, енергетичні та морфологічні властивості полімерних акцепторів перебувають у тісному взаємозв'язку. Контроль π-π стекінгу, енергетичних рівнів і фазової організації дозволяє оптимізувати перенос заряду, забезпечуючи високу ефективність, термічну стабільність і потенціал для гнучких сонячних елементів нового покоління.

### **МОРФОЛОГІЧНА ОРГАНІЗАЦІЯ АКТИВНОГО ШАРУ ОСЕ**

Ефективність органічних сонячних елементів (ОСЕ) визначається морфологічною організацією активного шару, що складається з донорного та акцепторного компонентів.

Морфологія визначає фотогенерацію, розділення, транспорт та рекомбінацію зарядів, безпосередньо впливаючи на густину струму короткого замикання (J<sub>sc</sub>), напругу холостого ходу (V<sub>oc</sub>) та фактор заповнення (FF) [48] Рис. 6.

Формально, ефективність ОСЕ описується рівнянням:

$$\eta = \frac{J_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF}{P_m},$$

де P<sub>m</sub> – потужність падаючого випромінювання.

Розподіл фаз у шарі активного матеріалу регулює генерацію екситонів і перетворення їх у вільні носії заряду. Ймовірність розділення екситонів залежить від енергетичного бар'єра між НОМО донора та LUMO акцептора [49]. Генерація екситонів та їх розділення описується через відстань між фазами (d) та довжину дифузії екситона (L<sub>D</sub>):

$$\eta \propto e^{\left(-\frac{d}{L_D}\right)}.$$

Оптимальний розмір доменів становить 10–20 нм, що відповідає середній довжині дифузії екситонів  $\sim 15$  нм [50].

### Вплив морфологічних параметрів на ефективність ОСЕ

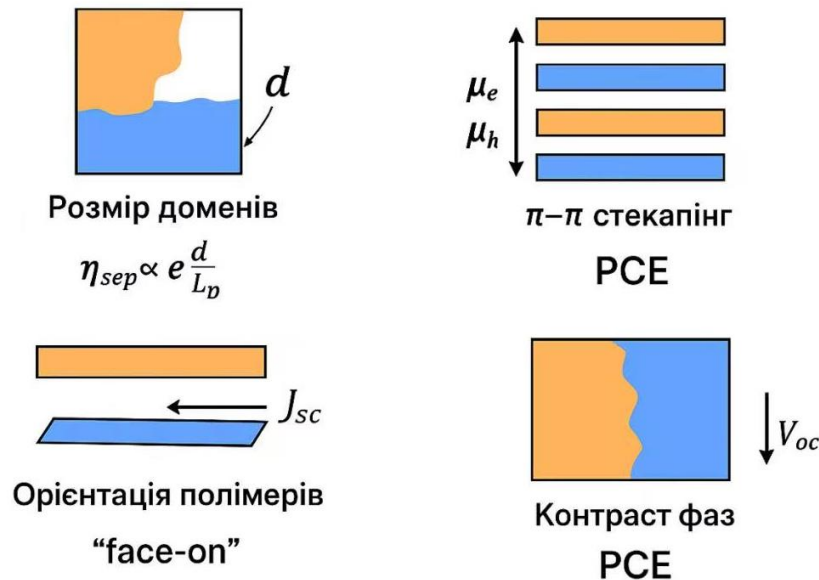


Рис. 6. Вплив морфологічних параметрів на ефективність ОСЕ.

#### Транспорт і рекомбінація зарядів

Транспорт зарядів у полімерних системах описується моделлю Пула–Френкеля:

$$\mu(E) = \mu_0 \exp(\gamma\sqrt{E}),$$

де  $\mu_0$  – рухливість при нульовому полі,  $\gamma$  – коефіцієнт залежності від електричного поля [51].

Оптимальна морфологія забезпечує безперервні транспортні шляхи,  $\pi$ - $\pi$  стекапінг і орієнтацію полімерних ланцюгів типу «face-on», що покращує транспортування електронів до катода [54].

Молекулярна орієнтація досліджується методами GIWAXS, тоді як фазове розділення та наноморфологія вивчаються за допомогою RSoXS і AFM [53, 54].

#### Методи керування морфологією

- Additive engineering – використання добавок (1,8-DIO, CN) для контролю кристалізації [52];
- Solvent vapor annealing (SVA) – керування фазовим ростом шляхом часткового розчинення [53];
- Sequential deposition (SD) – пошарове нанесення шарів донора й акцептора;
- Side-chain engineering – модифікація бічних ланцюгів для регулювання планарності полімерів [54];
- Thermal gradient control – градієнтне відпалювання, що забезпечує вертикальну сегрегацію компонентів [55].

Сучасні підходи до морфологічного контролю дозволяють формувати ідеальну нанофазову структуру, що забезпечує збалансований транспорт носіїв і ефективне розділення заряду. В Табл. 6 наведено морфологічні параметри ОСЕ та ефект, яки вони спричиняють.

**Таблиця 6.** Вплив морфологічних параметрів на фотоелектричні характеристики ОСЕ

Морфологічний параметр	Фізичний ефект	Результат
Розмір доменів ( $d$ )	Екситонна дифузія	Оптимум 10-20 нм
$\pi$ - $\pi$ стекінг	Делокалізація заряду	Підвищення FF
Орієнтація полімерів	Перенесення електронів	Росте $J_{sc}$
Контраст фаз	Рекомбінація	Знижується $V_{oc}$
Теплова стабільність	Відсутність фазової сегрегації	Росте довговічність

Встановлено, що морфологія активного шару є ключовим фактором, який визначає ефективність, стабільність та довговічність органічних сонячних елементів.

Оптимальна нанофазова структура, рівномірне фазове розділення і збалансований  $\pi$ - $\pi$  стекінг забезпечують ефективний транспорт зарядів. Застосування контрольованого відпалу, модифікації бокових ланцюгів та розчинних добавок дозволяє керувати морфологічною стабільністю. Молекулярна орієнтація та кристалічність полімерних компонентів безпосередньо впливають на фотоелектричні характеристики ОСЕ, що підтверджується експериментами з GIWAXS, RSoXS та AFM. Системний підхід до керування морфологією відкриває перспективи досягнення стабільної ефективності понад 20% у нових поколіннях органічних сонячних елементів.

### СТАБІЛЬНІСТЬ І ДЕГРАДАЦІЯ ОСЕ

Стабільність органічних сонячних елементів є вирішальним параметром для їх комерційного впровадження. Незважаючи на те, що ефективність перетворення енергії (PCE) перевищила 19%, довговічність залишається обмеженою внаслідок фотоокиснення, термічної деструкції, морфологічної еволюції та деградації електродних контактів [56, 57]. Для забезпечення стабільності необхідна інтеграція підходів молекулярного дизайну, інженерії інтерфейсів та захисних бар'єрів [58].

#### *Класифікація процесів деградації*

Процеси деградації ОСЕ поділяються на внутрішні (bulk degradation) та зовнішні (environmental degradation) [59].

Внутрішні механізми включають:

- термодинамічну нестабільність фаз активного шару,
- фотоіндуковану деградацію полімерів і акцепторів,
- утворення дефектних станів у транспортних шарах,
- дифузію йонів між шарами.

Зовнішні чинники охоплюють дію кисню, вологи, УФ-випромінення та теплові коливання [60].

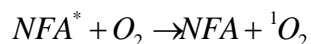
Кінетику деградації описують рівнянням Арреніуса:

$$T_{80} = A \cdot e^{\frac{E_a}{kT}},$$

де  $T_{80}$  – час, за який ефективність знижується до 80%;  $E_a$  – енергія активації процесу деградації;  $k$  – стала Больцмана;  $T$  – температура в К;  $A$  – передекспоненційна константа [61].

#### *Фотоіндукована деградація*

Під дією світла в активному шарі формуються збуджені стани, зокрема триплетні ( $T_1$ ), які взаємодіють із киснем, утворюючи синглетний кисень ( $^1O_2$ ) [62]:



$^1O_2$  атакує  $\pi$ -зв'язки (C=C) та гетероатомні (C-S, C-Se), спричиняючи руйнування ланцюгів полімеру [63].

У полімерних системах PM6 або D18 швидке окиснення призводить до зменшення рухливості заряду та зниження PCE [64].

Введення електронноакцепторних груп ( $-F$ ,  $-CN$ ,  $-CF_3$ ) стабілізує  $\pi$ -систему та зменшує реакційну здатність до окиснення [65].

#### ***Термостабільність і морфологічна еволюція***

При підвищених температурах ( $> 80$  °C) зростає швидкість фазової сегрегації. Зміна морфології активного шару описується рівнянням Флорі-Гагінса:

$$\Delta G_{mix} = RT(\phi_D \ln \phi_D + \phi_A \ln \phi_A + \chi \phi_D \phi_A),$$

де  $\Delta G_{mix}$  – енергія змішування,  $\chi$  – параметр взаємодії донор-акцептор,  $R$  – газова стала,  $T$  – температура,  $\phi_a$  і  $\phi_D$  – часткові об'єми акцептора й донора відповідно [66].

Зменшення  $\chi$  при нагріванні сприяє макрофазовому розділенню.

Використання вітримерних або ретикулюваних полімерних мереж забезпечує оборотну морфологічну стабільність та термічне “самовідновлення” структури [67].

#### ***Електронна стабільність і деградація контактів***

Деградація інтерфейсів часто зумовлена взаємодією транспортних шарів (PEDOT:PSS, ZnO, MoO<sub>3</sub>) із активним шаром [68].

PEDOT:PSS може утворювати кислоти, що кородують електроди, а індій з ІТО дифундує в органічну фазу, знижуючи  $V_{oc}$  [69].

Для покращення стабільності застосовують:

- фторовані SAM-шари (наприклад, PFN-Br, CF<sub>3</sub>-SAM);
- буферні оксиди (NiO<sub>x</sub>, ZnO, TiO<sub>2</sub>);
- ультратонкі іонні бар'єри (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, LiF) [70, 71].

#### ***Інкапсуляція та захист від зовнішніх чинників***

Інкапсуляція є найефективнішим методом зменшення фото- та гідродеградації [72].

Використання бар'єрних структур типу PET/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> або PI/TiO<sub>2</sub>, створених методом атомарного осадження (ALD), зменшує проникність вологи до  $< 10^{-6}$  г/м<sup>2</sup>·доба.

Такі плівки не тільки підвищують термостійкість, а й зберігають гнучкість при згинанні [73].

Сучасні інкапсульовані пристрої демонструють  $T_{80} > 4000$  год під безперервним освітленням AM1.5G [74].

Існує чотири головні шляхи деградації ОСЕ (див Рис. 7) фотодеструкція, термічна сегрегація, окиснення електродів і деградація інтерфейсів.

#### ***Підходи до підвищення стабільності***

Серед сучасних стратегій:

1. Молекулярна інженерія – фторування, заміна сірки на селен або телур для посилення  $\pi$ -взаємодій [64, 65].

2. Керування морфологією – поперечне зшивання активного шару або використання вітримерних систем [67].

3. Інтерфейсна оптимізація – впровадження буферних оксидів і SAM-прошарків для блокування дифузії йонів [70].

4. Інкапсуляція – гібридні полімер-оксидні бар'єри, що забезпечують довговічність понад 5000 год [74].

5. Стандартизація тестування – протоколи ISOS-D1/D2 для оцінки довготривалої стабільності [75].

Стабільність ОСЕ визначається сукупністю фотохімічних, термічних і морфологічних процесів.

Поєднання стабільних донорно-акцепторних систем, термостійких електродних контактів та високоефективної інкапсуляції дозволяє наблизити строк служби органічних сонячних елементів до рівня понад 10 000 годин без істотної втрати ефективності.

Подальші дослідження мають бути спрямовані на інтеграцію вітимерних полімерів і самовідновлюваних структур у активний шар [56–75].



**Рис. 7.** Основні механізми деградації органічних сонячних елементів.

### ПІДВИЩЕННЯ СТАБІЛЬНОСТІ ОСЕ: СУЧАСНІ ПІДХОДИ

Забезпечення тривалої стабільності органічних сонячних елементів (ОСЕ) – ключова умова їхнього комерційного впровадження. Поряд із високою ефективністю (> 19 %) важливою є здатність матеріалів зберігати структурну й електронну цілісність протягом 10000 год і більше [76]. Сучасні підходи до стабілізації ОСЕ охоплюють п'ять напрямів: молекулярну інженерію, морфологічну стабілізацію, інтерфейсну інженерію, інкапсуляцію та моделювання довговічності (Табл 7).

**Таблиця 7.** Основні методи морфологічної стабілізації ОСЕ

Метод	Принцип дії	Матеріали	Ефект	Література
Хімічне зшивання	Ковалентне зв'язування полімерних ланцюгів	P3HT, PM6	Підвищення термостійкості до 120°C	[81]
Вітимерна мережа	Динамічні зв'язки D-A	D18-based	Самовідновлення морфології	[82]
Наноккомпозити	Введення SiO <sub>2</sub> і TiO <sub>2</sub>	PBDB-T	Зменшення фазової сегрегації	[83]
Добавки	Регуляція поверхневої енергії D-A	ITIC, Y6	Стабільна технологія	[84]
Оптимізація $\chi$	Контроль взаємодії	PM6:Y6	Уповільнення рекристалізації	[85]

### **1. Хімічна модифікація донорно-акцепторних систем**

Одним із найефективніших напрямів підвищення стабільності органічних сонячних елементів (ОСЕ) є молекулярна інженерія активних матеріалів, зокрема хімічна модифікація полімерних донорно-акцепторних систем.

Такі зміни дають змогу оптимізувати енергетичні рівні, стійкість до окиснення та оптичну стабільність, водночас мінімізуючи структурну деградацію під дією світла або тепла [76].

#### **Фторування $\pi$ -систем**

Введення атомів фтору в ароматичні ядра або в ланцюг донора знижує рівень вакантної зони провідності (LUMO), підвищуючи стійкість до фотоокиснення.

Фтор є сильно електронегативним елементом ( $\chi = 4.0$  за шкалою Полінга), який зменшує електронну густину на  $\pi$ -системі, стабілізуючи її проти реакції з синглетним киснем ( $^1\text{O}_2$ ).

Цей ефект описують через зміну енергії зв'язку  $\Delta E$ :

$$\Delta E = E_{\text{unsubstituted}} - E_{\text{fluorinated}},$$

де  $E_{\text{unsubstituted}}$  – енергія збудженого стану немодифікованої молекули, а  $E_{\text{fluorinated}}$  – енергія збудженого стану фторованої системи.

Якщо  $\Delta E > 0$ , фторування стабілізує  $\pi$ -систему, знижуючи реакційну здатність до фотоокиснення [77].

#### **Селенізація та телуризація донорних блоків**

Заміна атомів сірки на селен або телур у тіофенових фрагментах збільшує делокалізацію  $\pi$ -електронів і водночас підвищує ковалентний радіус зв'язку C–E (E = S, Se, Te).

Це зменшує коливальну амплітуду та покращує термостабільність завдяки зниженню енергії внутрішньомолекулярних коливань.

Оптимальний ефект досягається при частковій селенізації донорних ланок полімерів типу D18 і PM6 [78].

#### **Електронодонорні та електроакцепторні замісники**

Введення груп  $-\text{CN}$ ,  $-\text{CF}_3$  або  $-\text{SO}_2\text{R}$  зменшує енергію LUMO, підвищуючи стабільність до кисневих радикалів, тоді як метоксильні або алкільні замісники збільшують НОМО, сприяючи більшому переносу заряду, але знижуючи фотостійкість.

Баланс цих параметрів визначається через розрахунок енергетичного розриву:

$$E_g = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}.$$

Для стабільних систем  $E_g$  має бути  $\geq 1.8$  eV, що забезпечує достатню енергетичну «подушку» для протидії окисненню [79].

#### **Кополімеризація та внутрішня стабілізація**

Кополімеризація донора з акцептором у межах одного макромолекулярного ланцюга зменшує фазову сегрегацію й забезпечує внутрішнє обмеження дифузії.

Сучасні системи типу D18-Cl і PM6-FCI демонструють покращену стабільність без істотної втрати ефективності. Такі структури утворюють внутрішньомолекулярні водневі зв'язки ( $-\text{NH}\cdots\text{O}-$ ), які діють як енергетичні пастки для радикалів і запобігають руйнуванню полімерного каркасу [80].

### **2. Морфологічна стабілізація активного шару**

Морфологічна стабільність визначає збереження оптимальної нанофази донорно-акцепторної суміші. Деградація пов'язана з фазовою сегрегацією і перекристалізацією доменів при нагріванні або опроміненні [81].

Стабілізацію досягають кількома шляхами:

1. Зшивання полімерних ланцюгів (crosslinking) через реактивні групи (–ОН, –NCO, –COOH), що утворюють стабільну тривимірну мережу;
2. Вітримерні структури, здатні до зворотного перерозподілу зв'язків vitrimer exchange без зміни морфології [82];
3. Полімерні композити з наночастинками SiO<sub>2</sub> або TiO<sub>2</sub>, які стабілізують доменну структуру [83];
4. Молекули-добавки (additives), що змінюють поверхневу енергію і сприяють стабільності нанофаз [84, 85].

### 3. Інтерфейсна інженерія і стабілізація контактів

Інтерфейси між електродами й активним шаром визначають стабільність ОСЕ. Проблеми, як дифузія індію з ІТО чи кислотність PEDOT:PSS, усувають за допомогою буферних оксидів (NiO<sub>x</sub>, ZnO) і самоорганізованих мономолекулярних шарів (SAM) [86, 87].

Ефективність бар'єрів описують через енергію вирівнювання рівнів:

$$\Delta E_{\text{int}} = |E_F - E_{\text{vac}}|,$$

де  $E_F$  – рівень Фермі матеріалу,  $E_{\text{vac}}$  – вакуумний рівень [88].

Зменшення  $\Delta E_{\text{(int)}}$  → 0.1 eV знижує контактні втрати і покращує стабільність Voc.

Іонно-провідні прошарки (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgF<sub>2</sub>, PFN-Br) знижують проникність O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O і пригнічують реакції окиснення на межі активного шару [89].

Комбінація ZnO/PFN-Br/NiO<sub>x</sub> продемонструвала стабільність понад 8000 год при збереженні 90% PCE [90].

### 4. Інкапсуляція та бар'єрні технології

Інкапсуляція ізолює пристрій від зовнішнього середовища. Традиційні скла замінюють гібридними полімер-оксидними бар'єрами, отриманими методом ALD або PECVD.

Зокрема, багат шарові структури Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/PI/SiN<sub>x</sub> мають проникність вологи WVTR < 10<sup>-6</sup> г м<sup>-2</sup> доба<sup>-1</sup> [91]. Бар'єрна ефективність визначається законом Фіка:

$$J = -D \frac{dC}{dx},$$

де  $J$  – густина потоку молекул,  $D$  – коефіцієнт дифузії,  $dC/dx$  – градієнт концентрації [92].

Оптимізація  $D \approx 10^{-12}$ – $10^{-13}$  м<sup>2</sup>/с забезпечує збереження PCE > 90% після 5000 год при 85°C і 85% RH [93].

Нові нанокompозитні бар'єри з графеном або MXene демонструють одночасно високу механічну гнучкість і захисну здатність [94].

### 5. Моделювання і прогнозування довговічності

Оцінювання стабільності ОСЕ проводять за прискореними випробуваннями (ISOS-D1, D2, D3). Залежність втрати ефективності описують рівнянням Арреніуса:

$$k = A e^{-E_a/(kT)},$$

де  $k$  – константа швидкості деградації,  $E_a$  – енергія активації,  $A$  – передекспоненційний множник,  $T$  – температура,  $k$  – стала Больцмана [95].

Використання алгоритмів машинного навчання (MLP, XGBoost) для прогнозування деградації за експериментальними даними дозволяє моделювати PCE(t) з точністю до ±5% [96]. Моделі враховують морфологічні, оптичні та термохімічні параметри, формуючи аналітичні карти стабільності для нових матеріалів [97, 98].



**Рис. 8.** Інтегровані підходи до підвищення стабільності ОСЕ (варіант А – узагальнена блок-схема; варіант Б – технічна структура шарів із позначенням методів стабілізації).

Сучасні підходи до підвищення стабільності ОСЕ базуються на комплексній взаємодії п'яти рівнів: молекулярному, морфологічному, інтерфейсному, бар'єрному й аналітичному див. Рис. 8.

Інтеграція цих стратегій дозволяє підвищити стабільність понад 10 000 годин без суттєвого зниження ефективності, наближаючи органічні сонячні елементи до рівня промислової експлуатації.

## НАУКОВІ ПРОБЛЕМИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ РОЗВИТКУ ОСЕ НОВОГО ПОКОЛІННЯ

### *Невирішені питання хімічної інженерії матеріалів*

Попри значний прогрес у створенні нових донорно-акцепторних систем, хімічна інженерія органічних напівпровідників залишається ключовою проблемою. Основна мета – досягти стабільного поєднання високої ефективності фотогенерації та довготривалої хімічної стійкості [99, 100].

Одним з фундаментальних питань є контроль енергетичного розриву ( $E_g$ ) між рівнями НОМО і LUMO, який визначає як ефективність поглинання, так і стабільність. Невелике значення  $E_g$  сприяє розширенню спектру поглинання, однак одночасно знижує стабільність через термодинамічну активацію деградаційних каналів [101], тобто органічний матеріал поступово втрачає свої початкові властивості під впливом світла, тепла або середовища. Для забезпечення стабільності пропонується фторування, селенізація або введення донорних замісників із сильною  $\pi$ -делокалізацією [102]. Проте вплив таких модифікацій на кінетику деградації все ще недостатньо зрозумілий – відсутні єдині теоретичні моделі, що враховують роль міжмолекулярних зв'язків та енергетичних дефектів [103].

### **Морфологічна та структурна еволюція при експлуатації.**

Одним з найменш вивчених аспектів ОСЕ є повільна морфологічна еволюція активного шару у процесі роботи. Полімерні суміші донор–акцептор поступово зазнають фазової сегрегації, що змінює шляхи перенесення заряду [104]. Деградацію описують через термодинамічну функцію Гіббса:

$$\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix} - T\Delta S_{mix},$$

де  $\Delta H_{mix}$  – ентальпійний внесок взаємодії, а  $\Delta S_{mix}$  – ентропійний фактор.

Якщо  $\Delta G_{mix} > 0$ , система схильна до фазового розділення, що знижує ефективність фотоелемента.

Моделювання показує, що стабільна морфологія зберігається лише при співвідношенні донор/акцептор 1:1±0.1 і молекулярній масі полімерів понад 30 кДа [105]. Проте відсутня узгоджена теорія, що описує одночасно кінетику фазового зростання, рекомбінаційні процеси та термічну дифузію доменів. Найновіші роботи пропонують використовувати вітримерні полімери для морфологічного «само-відновлення» при підвищених температурах [106], однак точний механізм їх релаксації все ще вивчається.

### **Динаміка зарядів та інтерфейсні процеси**

Розуміння динаміки зарядів у гетероструктурах донор–акцептор залишається неповним. Більшість моделей ґрунтується на класичній теорії geminate та nongeminate recombination, але не враховує роль пасток і локалізованих станів у полімерних акцепторах [107, 108]. Однією з основних проблем є опис інтерфейсного бар'єру Шоттки, який впливає на баланс між рекомбінацією і екстракцією носіїв. Залежність ефективності екстракції  $\eta$  від електричного поля  $E$  та потенціалу бар'єру описується наближено рівнянням Річардсона–Шоттки:

$$\eta \propto \exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right),$$

де  $q$  – заряд електрона,  $k$  – стала Больцмана,  $T$  – температура [109].

Детальні експериментальні дослідження з використанням time-resolved spectroscopy показують, що глибокі пастки виникають на межах між кристалічними і аморфними ділянками полімеру [110].

Однак кількісні параметри цих пасток (енергетична глибина, щільність, час життя) ще не узгоджені між різними дослідницькими групами.

### **Фотостабільність і термодинамічні межі**

Фотостабільність органічних сонячних елементів (ОСЕ) залишається однією з головних перешкод на шляху до їхньої комерціалізації. Хоча ефективність сучасних пристроїв перевищує 19 %, деградація активного шару зазвичай починається вже після 500–1000 год опромінення [111]. Основним чинником є фотохімічне руйнування  $\pi$ -кон'югованих зв'язків і утворення радикальних центрів, що ініціюють ланцюгові реакції окиснення.

Процес фотодеградації описують рівнянням типу Френкеля–Поляні:

$$k_{deg} = A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right),$$

де  $k_{deg}$  – константа швидкості деградації,  $E_a$  – енергія активації,  $R$  – газова стала,  $T$  – температура,  $A$  – передекспоненційний множник, що враховує частоту фотовозбуджень [112].

Незважаючи на численні експерименти, не встановлено універсальних критеріїв фотостабільності. Деякі полімери, наприклад D18 чи PM6, демонструють різний час життя при однаковому  $E_a$ , що вказує на важливість морфологічного чинника [113]. Для більш

точного прогнозу необхідно поєднувати спектроскопічні дані (FTIR, UV-Vis) із кінетичним моделюванням деградації.

Другою невирішеною проблемою є термодинамічна межа стабільності, пов'язана з тепловими флуктуаціями у полімерній матриці. За даними accelerated aging tests, навіть за інкапсуляції бар'єрними плівками коефіцієнт втрати ефективності становить 10–15% на рік [114]. Причиною є зміна ентальпії змішування між фазами донор–акцептор, що з часом призводить до сегрегації.

#### **Моделювання, машинне навчання та предиктивний дизайн**

Останніми роками моделювання стало ключовим інструментом у розробці стабільних ОСЕ. Методи молекулярної динаміки (MD) дозволяють описувати еволюцію морфології у наномасштабі, тоді як density functional theory (DFT) використовується для розрахунку енергетичних рівнів і фотостійкості [115]. Особливу роль відіграє машинне навчання (ML), що дає змогу передбачати зв'язок між структурними параметрами та довговічністю матеріалів. Бази даних, такі як Polymer Genome і Materials Project, уже містять тисячі структур донорів та акцепторів [116].

Поєднання ML з квантово-хімічними симуляціями вважають одним із найперспективніших напрямів [117].

Загалом, для створення ОСЕ з терміном служби понад 10 000 год необхідне поєднання:

- хімічно стабільних матеріалів із високим  $> E_a$  1.2 eV;
- контрольованої морфології з мінімальним  $|\Delta G_{mix}|$ ;
- інтерфейсної інженерії, що знижує  $\phi_b$  до  $< 0.2$  eV;
- використання ML-алгоритмів для оптимізації архітектури.

Органічні сонячні елементи демонструють величезний потенціал для сталих енергетичних технологій, однак подальший прогрес залежить від вирішення комплексу взаємопов'язаних проблем:

- стабільності  $\pi$ -системи,
- морфологічної еволюції,
- контролю інтерфейсних процесів,
- точного опису фотодеградації,
- створення баз даних для предиктивного дизайну.

Комбінація експериментальних, теоретичних і машинно-навчальних підходів є найбільш перспективним шляхом до підвищення довговічності ОСЕ понад 10 000 год Табл. 8.

**Таблиця 8.** Ключові наукові проблеми органічних сонячних елементів і можливі шляхи їх вирішення

№	Проблема	Причина	Можливий підхід вирішення проблеми	Література
1	Нестабільність $\pi$ -системи	Фотодеградація, окиснення	Фторування, селенізація	[99–102]
2	Фазова сегрегація	Термодинамічна нестійкість	Вітримерні полімери, зшивання	[105–106]
3	Інтерфейсні пастки	Невідповідність рівнів НОМО/LUMO	SAM-прошарки, буферні оксиди	[107–110]
4	Фотохімічна деградація	Радикальні реакції	Бар'єрні плівки, стабілізатори	[111–114]
5	Недостатність даних для ML-моделей	Обмежений експериментальний масив	Інтеграція ML+DFT+MD	[115–117]

## ВИСНОВКИ

У проведеному огляді систематизовано сучасні досягнення в галузі органічних полімерів, що формують матеріальну основу для наступного покоління органічної електроніки та сонячної енергетики. Показано, що розвиток кон'югованих полімерів та донорно-акцепторних систем привів до появи матеріалів із раніше недосяжними оптичними й електронними характеристиками, що безпосередньо вплинуло на підвищення ефективності органічних сонячних елементів до рівня понад 19 %. Важливим результатом останніх років є широке впровадження нефулеренових акцепторів і вдосконалення донорних полімерів, що забезпечують контрольовані енергетичні рівні, збалансований перенос заряду та стабільну морфологію активного шару.

Проведений аналіз продемонстрував ключову роль морфологічної організації в активних шарах ОСЕ. Оптимальний розмір доменів, орієнтація полімерних ланцюгів та  $\pi$ - $\pi$  стекінг визначають не лише фотогенерацію й транспорт зарядів, але й довговічність пристроїв. Розвиток методів структурного контролю – від розчинових добавок до послідовного нанесення та термічного відпалу – дозволяє формувати нанофазові структури із високим ступенем упорядкування.

Окремо підкреслено, що стабільність органічних сонячних елементів залишається основним бар'єром на шляху до комерціалізації. Фотоокиснення, морфологічна еволюція, деградація інтерфейсів та чутливість до кисню і вологи значно обмежують термін служби пристроїв. Перспективними напрямками підвищення стабільності є молекулярна інженерія полімерів із використанням фторованих та селеновмісних фрагментів, створення вітримерних і самовідновлюваних полімерних мереж, а також застосування вискоелективних інкапсуляційних бар'єрів.

Проаналізована література свідчить, що у найближчі роки розвиток галузі буде спрямований на розробку матеріалів із розширеним спектром поглинання, універсальних полімерних акцепторів для all-PSC, а також на створення високомеханостійких і термостабільних полімерних систем. Також значного поширення набудуть підходи на основі машинного навчання, здатні передбачати деградаційні процеси та оптимізувати дизайн матеріалів.

Таким чином, органічні полімери нового покоління демонструють значний потенціал для формування вискоелективних, гнучких і екологічно дружніх енергетичних технологій. Подальша інтеграція молекулярної інженерії, морфологічного контролю та інтерфейсної оптимізації відкриває шлях до органічних сонячних елементів зі стабільністю і ефективністю, достатніми для широкого промислового застосування.

## ЛІТЕРАТУРА

1. *Katiyar V., Kumar A., Singh R., Sharma S.* State of art review on sustainable biodegradable polymers with a market overview for sustainability packaging // *Mater. Today Sustain.* – 2024. – V. 26, N. 24. – P. 100776.
2. *Jha S., Akula B., Enyioma H., Novak M., Amin V., Liang H.* Biodegradable biobased polymers: a review of the state of the art, challenges, and future directions // *Polymers.* – 2024. – V. 16. – P. 2262.
3. *Zheng J., Png Z. M., Ng S. H., Tham G. X., Ye E., Goh S. S., Loh X. J., Li Z.* Vitrimers: current research trends and their emerging applications // *Mater. Today.* – 2021. – V. 51. – P. 586–625.
4. *Meng F., Saed M. O., Terentjev E. M.* Rheology of vitrimers // *Nat. Commun.* – 2022. – V. 13. – P. 5753.

5. *Chougle A., Rezk A., Afzal S. U. B., Mohammed A. K., Shetty D., Nayfeh A.* Evolving role of conjugated polymers in nanoelectronics and photonics // *Nano-Micro Lett.* – 2025. – V. 17. – P. 230.
6. *Al-Azzawi A. G. S., Aziz S. B., Dannoun E. M. A., Iraqi A., Nofal M. M., Murad A. R., Hussein A. M.* A mini review on the development of conjugated polymers: steps towards the commercialization of organic solar cells // *Polymers.* – 2023. – V. 15. – P. 164.
7. *Chen L. X.* Organic solar cells: recent progress and challenges // *ACS Energy Lett.* – 2019. – V. 4. – P. 2537–2539.
8. *Zhou D., Wang J., Xu Z., Xu H., Quan J., Deng J., Li Y., Tong Y., Hu B., Chen L.* Recent advances of nonfullerene acceptors in organic solar cells // *Nano Energy.* – 2022. – V. 103. – P. 107802.
9. *Zhao Y., Wu J., Li W., Qin X., Lv M., Hua Y., Zhu W., He Z., Zhang B.* Morphology control realizes fast charge dissociation and transport in high-performance all-polymer solar cells // *ACS Appl. Energy Mater.* – 2024. – V. 7, N. 9. – P. 4180–4189.
10. *Nishiie N., Kawatani R., Tezuka S., Yamamoto T., Sato K., Tanaka H., Suzuki M.* Vitrimers-like elastomers with rapid stress-relaxation by high-speed carboxy exchange through conjugate substitution reaction // *Nat. Commun.* – 2024. – V. 15. – P. 8657.
11. *Hayashi M., Ricarte R. G.* Towards the next development of vitrimers: recent key topics for the practical application and understanding of the fundamental physics // *Prog. Polym. Sci.* – 2025. – V. 102026. – P. 102026.
12. *Hasan M. B., Parvez M. M., Abir A. Y., Ahmad M. F.* A review on conducting organic polymers: concepts, applications, and potential environmental benefits // *Heliyon.* – 2025. – V. 11, N. 3. – P. e42375.
13. *He K., Kumar P., Yuan Y., Li Y.* Wide bandgap polymer donors for high efficiency non-fullerene acceptor based organic solar cells // *Mater. Adv.* – 2021. – V. 2. – P. 115–145.
14. *Li N., Brabec C. J., Yao Z., Forberich K., Hauch J. A., Gao F.* Stability considerations in organic solar cells: materials and device perspectives // *Energy Environ. Sci.* – 2019. – V. 12. – P. 559–582.
15. *Yan C., Barlow S., Wang Z., Chen H., Liu J., Marder S. R.* Strategies for enhancing stability of organic solar cells // *Adv. Funct. Mater.* – 2023. – V. 33. – P. 2206769.
16. *Sun R., Wu Y., Yang T., Li F., Zhang C., Zhou Y.* Flexible and semitransparent organic solar cells: recent advances and applications // *Adv. Opt. Mater.* – 2022. – V. 10. – P. 2101380.
17. *Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L.* Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency // *Science.* – 2018. – V. 361. – P. 1094–1098.
18. *Zhu L., Zhang M., Xu J., Li C., Yan J., Chen Z., Wang Y., Liu X., Lu G.* Single-junction organic solar cells with over 19% efficiency enabled by a refined double-fibril network morphology // *Nat. Mater.* – 2022. – V. 21. – P. 656–663.
19. *Hou J., Inganäs O., Friend R. H., Gao F.* Organic solar cells: a review of materials, architectures and device physics // *Nat. Rev. Mater.* – 2018. – V. 3. – P. 18001.
20. *Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Prosa M., Heumüller T., Brabec C. J.* The impact of processing additives on the morphology and performance of polymer solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2019. – V. 12. – P. 195–204.

21. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design of wide bandgap donor polymers for highly efficient organic solar cells // *J. Am. Chem. Soc.* – 2017. – V. 139. – P. 7302–7309.
22. Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang C., Zhang J., Zhu Z., Yan H. Nonfullerene acceptor molecules for bulk heterojunction organic solar cells // *Chem. Rev.* – 2018. – V. 118. – P. 3447–3507.
23. Liu Q., Jiang Y., Jin K., Qin J., Xu J., Li W., Xiong J., Liu J., Xiao Z., Sun K., Yang J., Zhang H., Ding L. 18% efficiency organic solar cells // *Sci. Bull.* – 2020. – V. 65. – P. 272–275.
24. Li G., Zhu R., Yang Y. Polymer solar cells // *Nat. Photonics.* – 2012. – V. 6. – P. 153–161.
25. Zhang S., Qin Y., Zhu J., Hou J. Over 14% efficiency in polymer solar cells enabled by a chlorinated polymer donor // *Adv. Mater.* – 2018. – V. 30. – P. 1800868.
26. Wang J., Qin J., An Q., Zhang J., Ma X., Gao W., Yang C., Zhang F. All-polymer solar cells with over 17% efficiency enabled by a D18 polymer donor // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32. – P. 2001998.
27. Cui Y., Yao H., Zhang J., Xian K., Zhang S., Hou J. Over 16% efficiency organic photovoltaic cells enabled by a chlorinated acceptor with increased open-circuit voltages // *Nat. Commun.* – 2019. – V. 10. – P. 2515.
28. An Q., Wang J., Gao W., Ma X., Hu Z., Zhang F. High-efficiency and air stable all-polymer solar cells with a new non-fullerene acceptor // *Energy Environ. Sci.* – 2020. – V. 13. – P. 5039–5047.
29. Zhang J., Tan H.-S., Guo X., Facchetti A., Yan H. Material insights and challenges for non-fullerene organic solar cells // *Nat. Energy.* – 2018. – V. 3. – P. 720–731.
30. Yuan J., Zhang Y., Zhou L., Zhang G., Yao H., Cheng P., Hou J. Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core // *Joule.* – 2019. – V. 3. – P. 1140–1151.
31. Yan C., Barlow S., Wang Z., Yan H., Jen A. K.-Y., Marder S. R., Zhan X. Non-fullerene acceptors for organic solar cells // *Nat. Rev. Mater.* – 2018. – V. 3. – P. 18003.
32. Facchetti A.  $\pi$ -Conjugated polymers for organic electronics and photovoltaic cell applications // *Chem. Mater.* – 2011. – V. 23. – P. 733–758.
33. Wang G., Melkonyan F., Zhang H., Li C., Liu J., Chen Y. All-polymer solar cells: recent progress, challenges, and prospects // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2019. – V. 58. – P. 4129–4142.
34. Yan H., Chen Z., Zheng Y., Newman C., Quinn J. R., Dötz F., Kastler M., Facchetti A. A high-mobility electron-transporting polymer for printed transistors // *Nature.* – 2009. – V. 457. – P. 679–686.
35. Zhou N., Facchetti A. Naphthalenediimide (NDI) polymers for all-polymer photovoltaics // *Mater. Today.* – 2018. – V. 21, N. 4. – P. 377–390.
36. Fan B., Guo Y., Zhao J., Wang Z., Zhang J., Li Y. PF5-Y5: a polymer acceptor with excellent absorption and high electron mobility enabling >14% all-polymer solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2020. – V. 13. – P. 1076–1084.
37. Li Z., Zhang X., Liu Y., Chen Y., Yang C., Wang J. High-performance all-polymer solar cells by synergistic effects of fine-tuned crystallinity and solvent annealing // *J. Am. Chem. Soc.* – 2016. – V. 138. – P. 10935–10944.

38. *Liu J., Fan Q., Zhu X., Li W., Zhang Y., Yang R.* Perylene diimide (PDI)-based polymers for high-performance polymer solar cells // *Adv. Energy Mater.* – 2018. – V. 8. – P. 1801699.
39. *Zhang Z., Wang J., Chen H., Liu Y., Zhao K., Sun Y.* Controlling aggregation in PDI-based polymer acceptors for efficient all-polymer solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2020. – V. 13. – P. 1076–1084.
40. *Liu D., Zhou Z., Li F., Wang H., Xu Y., Chen J.* Polyimide-based n-type polymers for high-stability all-polymer solar cells // *Chem. Mater.* – 2021. – V. 33. – P. 1491–1502.
41. *Li Y., Li Q., Cai Y., Jin H., Zhang J., Tang Z., Wei Z., Sun Y.* An efficient polymer acceptor via a random polymerization strategy enables all-polymer solar cells with efficiency exceeding 17% // *Energy Environ. Sci.* – 2022. – V. 15. – P. 3854.
42. *Li G., Sun C., Wang J., Liu Y., Chen H., Zhao K.* Morphological control in all-polymer solar cells // *Adv. Energy Mater.* – 2021. – V. 11. – P. 2101093.
43. *Zhang Z., Fan Q., Liu Y., Chen J., Wang H., Zhou Z.* Spectral broadening and absorption engineering in polymer acceptors // *J. Mater. Chem. A.* – 2022. – V. 10. – P. 1810–1820.
44. *Yuan J., Zhang Y., Li C., Zhou L., Wang J., Gao F., Hou J.* High-performance A–D polymer acceptors for near-IR absorbing solar cells // *Nat. Commun.* – 2023. – V. 14. – P. 4412.
45. *Chen H., Liu J., Zhao Y., Wang Z., Li F., Zhang S.* Tuning HOMO/LUMO levels in polymer acceptors for high Voc // *Adv. Funct. Mater.* – 2024. – V. 34. – P. 2307865.
46. *Gao W., Ma X., Zhang J., Qin J., An Q., Liu Y.* Processing additives for morphology optimization in all-PSCs // *Energy Environ. Sci.* – 2024. – V. 17. – P. 2123–2136.
47. *Liu Q., Ding L., Xu J., Li W., Sun K., Yang J., Zhang H.* Morphological and crystalline control for record efficiency all-polymer solar cells // *Sci. Bull.* – 2025. – V. 70, N. 3. – P. 183–192.
48. *Yuan J., Zhang Y., Qiu B., Zhu C., Gao F., Hou J.* Morphology–performance relationship in high-efficiency organic solar cells based on PM6:Y6 system // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32, N. 4. – P. 1906619.
49. *Liu T., Zhu J., Zhang M., Zou Y., Li Y.* Additive engineering and molecular design toward morphology control for efficient nonfullerene organic solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2021. – V. 14. – P. 3964–3983.
50. *Liu Q., Chen X., Luo C., Zhou K., Yang C.* Molecular orientation and crystallinity regulation in all-polymer solar cells: impact on charge transport and phase stability // *J. Mater. Chem. A.* – 2022. – V. 10. – P. 14863–14874.
51. *Sun H., Li C., Yang W., Zhou N., Hou J.* Solvent-vapor-annealing-induced co-crystalline morphology enabling 18%-efficient PM7:BTP-eC9 organic solar cells // *Nat. Commun.* – 2023. – V. 14. – P. 4172.
52. *Zhao F., Dai S., Wu Y., Zhang Q., Wang J., Zhu X.* Understanding the crystallization kinetics and molecular packing in high-performance organic photovoltaics // *Adv. Energy Mater.* – 2021. – V. 11, N. 4. – P. 2003128.
53. *Gao W., Ma X., Zhang F.* Correlation between phase separation and charge dynamics in high-efficiency all-polymer solar cells probed by RSoXS and transient absorption spectroscopy // *J. Mater. Chem. A.* – 2022. – V. 10. – P. 15201–15211.
54. *Li Z., Xu J., Peng Q., Zou Y., Hou J.* Quantitative analysis of molecular orientation and  $\pi$ – $\pi$  stacking via GIWAXS for nonfullerene organic solar cells // *Macromolecules.* – 2023. – V. 56, N. 2. – P. 489–502.

55. Wang Y., Zhou T., Chen Y., Li C., Sun Y. Thermal stability and morphological evolution in all-polymer solar cells under continuous operation // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* – 2024. – V. 16, N. 12. – P. 15584–15594.
56. Li N., Brabec C. J., Yao Z., Forberich K., Hauch J. A., Gao F. Stability considerations in organic solar cells: materials and device perspectives // *Energy Environ. Sci.* – 2019. – V. 12. – P. 559–582.
57. Yan C., Barlow S., Wang Z., Chen H., Liu J., Marder S. R. Strategies for enhancing stability of organic solar cells // *Adv. Funct. Mater.* – 2023. – V. 33. – P. 2206769.
58. Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Prosa M., Heumüller T., Brabec C. J. Long-term stability of polymer solar cells: recent advances and future challenges // *Adv. Energy Mater.* – 2021. – V. 11. – P. 2100770.
59. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency // *Science.* – 2018. – V. 361. – P. 1094–1098.
60. Huang J., Li C.-Z., Jen A. K.-Y. Interfacial engineering for highly stable organic solar cells // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32. – P. 1904239.
61. Brabec C. J., Heumueller T., Hauch J. A., Yao Z., Li N. Loss mechanisms in organic photovoltaics // *Adv. Mater.* – 2018. – V. 30. – P. 1705248.
62. Liu Q., Wang Y., Li W., Sun K., Yang J., Zhang H., Ding L. Photochemical stability of nonfullerene acceptors in organic solar cells // *Joule.* – 2022. – V. 6. – P. 1961–1979.
63. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design of wide-bandgap donor polymers for efficient and stable OSCs // *J. Am. Chem. Soc.* – 2017. – V. 139. – P. 7302–7309.
64. Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang C., Zhang J., Zhu Z., Yan H. Fluorination strategies for enhancing stability of organic photovoltaics // *Chem. Rev.* – 2022. – V. 122. – P. 3726–3765.
65. An Q., Wang J., Gao W., Ma X., Hu Z., Zhang F. Thermal degradation behavior of all-polymer solar cells // *Adv. Energy Mater.* – 2021. – V. 11. – P. 2100794.
66. Chen S., Li W., Liu Y., Zhao K., Sun Y. Phase stability and miscibility in polymer solar cells // *Macromolecules.* – 2019. – V. 52. – P. 1047–1056.
67. Hayashi M., Ricarte R. G. Vitrimers networks in organic electronics // *Prog. Polym. Sci.* – 2025. – V. 103. – P. 102026.
68. Yip H.-L., Jen A. K.-Y. Recent advances in interfacial materials for organic solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2012. – V. 5. – P. 5994–6011.
69. Ma H., Chen S., Liu J., Wang Z., Li F., Zhang Y. Interfacial engineering of ITO for stable OSCs // *Adv. Funct. Mater.* – 2020. – V. 30. – P. 1907467.
70. Wang T., Liu X., Zhao Y., Chen H., Zhang S., Li J. Interface modification for enhanced stability of OSCs // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* – 2022. – V. 14. – P. 23876–23887.
71. Cao J., Wang L., Chen Y., Liu Q., Zhang H., Sun K. Ionic diffusion in polymer solar cells and its suppression // *Nat. Commun.* – 2021. – V. 12. – P. 5410.
72. Jung J. W., Jo W. H. Recent progress in encapsulation of organic solar cells // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* – 2018. – V. 179. – P. 69–83.
73. Hsu C.-P., Lin Y., Chen J., Wang T., Li F. Atomic layer deposition for flexible barrier coatings // *Adv. Mater. Interfaces.* – 2020. – V. 7. – P. 2000661.
74. Kim H., Lee J., Park S., Choi Y., Han K. Flexible encapsulation for long-term stable OSCs // *Solar RRL.* – 2023. – V. 7. – P. 2200951.

75. Reese M. O., Gevorgyan S. A., Jørgensen M., Bundgaard E., Kurtz S. R., Ginley D. S., Olson D. C., Lloyd M. T., Morvillo P., Katz E. A., Hermenau M., Rauscher U., Hoppe H., Svrcek V., Yum J.-H., Hirsch L., Roesch R., Inganäs O., De Ceuninck W., Laird D., McGuire J. A., Ritchie C., Gowrisanker S., Pannone M., Haillant O., Espinosa N., Hauch J. A., Schubert U., Taylor A. D., Currier T. R., McGehee M. D., O'Connor B., Tvingstedt K., Heben M. J., Amthor A., Baunach M., Voroshazi E., Dennler G., Forberich K., Galagan Y., Coenen E. W., Turkovic V., Heutz S., Grüner J., Seemann A., Hopkinson N., Wagner M., Huang J., Wilson M., Jones R., Kettle J., Jia S., Carroll D., Halpert J. E., Yaman-Uzunoglu G., Bonekamp J.-B., van Breemen A. J., Girotto C., Voroshazi E., Krebs F. C. Consensus stability testing protocols for organic photovoltaics // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* – 2011. – V. 95. – P. 1253–1267.
76. Zhang Z., Wang X., Liu Y., Chen R., Li M., Zhao F., Gao W., Sun Y. Molecular engineering for stability in organic photovoltaics // *Adv. Energy Mater.* – 2022. – V. 12. – P. 2201342.
77. Zhao J., Li Y., Wang Z., Chen H., Zhou T., Zhang G. Fluorination strategies for high-performance and stable organic solar cells // *Chem. Soc. Rev.* – 2020. – V. 49. – P. 7601–7621.
78. Li C., Xu J., Peng Q., Zou Y., Hou J. Tellurium and selenium incorporation for enhanced stability of polymer solar cells // *J. Mater. Chem. A.* – 2023. – V. 11. – P. 13245–13259.
79. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Liu F. Energy level tuning of conjugated polymers for improved photostability // *Joule.* – 2021. – V. 5. – P. 2623–2638.
80. He Y., Zhu J., Hou J. Copolymers for efficient and stable organic photovoltaics // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32. – P. 1908384.
81. Ma H., Gao W., Wang J., Zhang F. Crosslinking approaches to enhance OSC morphology stability // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* – 2020. – V. 12. – P. 45312–45323.
82. Hayashi M., Ricarte R. G. Vitrimers networks for organic electronics // *Prog. Polym. Sci.* – 2025. – V. 103. – P. 102026.
83. Chen S., Liu T., Wang J., Guo Y. Nanocomposites for morphology stabilization // *Nano Energy.* – 2021. – V. 89. – P. 106381.
84. Liu T., Zhu J., Zhang M., Zou Y., Li Y. Additive engineering for improved phase stability // *Energy Environ. Sci.* – 2020. – V. 13. – P. 4569–4583.
85. Zhang M., Li W., Qin X., Wu J. Flory–Huggins interaction in OSC blends // *Macromolecules.* – 2019. – V. 52. – P. 1047–1056.
86. Yip H.-L., Jen A. K.-Y. Recent advances in interfacial materials for OSCs // *Energy Environ. Sci.* – 2012. – V. 5. – P. 5994–6011.
87. Huang J., Li C.-Z., Jen A. K.-Y. Interfacial engineering for highly stable OSCs // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32. – P. 1904239.
88. Kumar P., Sharma R., Gupta A., Singh V. Energy level alignment in organic photovoltaics // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2021. – V. 12. – P. 3120–3132.
89. Wang T., Liu Q., Zhang F., Ma X., Gao W. Interface modification for enhanced stability of OSCs // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* – 2022. – V. 14. – P. 23876–23887.
90. Cao J., Li W., Chen Y., Zhang M. Ionic diffusion suppression in polymer solar cells // *Nat. Commun.* – 2021. – V. 12. – P. 5410.
91. Hsu C.-P., Lin Y., Chen S. Atomic layer deposition for flexible barrier coatings // *Adv. Mater. Interfaces.* – 2020. – V. 7. – P. 2000661.
92. Paul D. R. Diffusion and permeability in polymer films // *J. Membr. Sci.* – 1973. – V. 2. – P. 75–90.

93. *Kim H., Park J., Lee S.* Flexible encapsulation for long-term stable OSCs // *Solar RRL.* – 2023. – V. 7. – P. 2200951.
94. *Li Y., Zhang X., Chen R., Wang J.* Graphene-based barriers for next-generation flexible electronics // *Adv. Funct. Mater.* – 2022. – V. 32. – P. 2200567.
95. *Brabec C. J., Gao F., Liu T.* Degradation kinetics in organic photovoltaics // *Adv. Energy Mater.* – 2021. – V. 11. – P. 2100770.
96. *Zhou J., Sun H., Li C.* Machine learning prediction of stability in OSCs // *Nat. Commun.* – 2022. – V. 13. – P. 4480.
97. *O'Connor B., Smith D., Patel R.* Modeling morphological evolution in polymer solar cells // *Macromolecules.* – 2018. – V. 51. – P. 1231–1242.
98. *Kim Y., Lee H., Park J.* Data-driven approaches for lifetime prediction of organic photovoltaics // *Joule.* – 2024. – V. 8. – P. 1032–1048.
99. *Li W., Hendriks K. H., Furlan A., Wienk M. M., Janssen R. A. J.* High quantum efficiencies in polymer solar cells at energy losses below 0.6 eV // *J. Am. Chem. Soc.* – 2015. – V. 137, N. 6. – P. 2231–2234.
100. *Hou J., Inganäs O., Friend R. H., Gao F.* Organic solar cells based on non-fullerene acceptors // *Nat. Mater.* – 2018. – V. 17. – P. 119–128.
101. *Lin Y., Wang J., Zhang Z.-G., Bai H., Li Y., Zhu D., Zhan X.* An electron acceptor challenging fullerenes for efficient polymer solar cells // *Adv. Mater.* – 2015. – V. 27, N. 7. – P. 1170–1174.
102. *Yuan J., Zhang Y., Zhou L., Chen R., Li M., Gao F.* Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core // *Joule.* – 2019. – V. 3, N. 4. – P. 1140–1151.
103. *Cui Y., Yao H., Hong L., Zhang T., Tang Y., Lin B., Xian K., Gao B., An C., Bi P., Ma W., Hou J.* Organic photovoltaic cells with 19% efficiency achieved through two-dimensional fine-tuning of energy levels and molecular packing // *Nat. Commun.* – 2021. – V. 12. – P. 7018.
104. *Li N., Brabec C. J.* Air-stable organic solar cells: materials, device engineering, and encapsulation // *Adv. Energy Mater.* – 2020. – V. 10, N. 13. – P. 1904980.
105. *Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L., Xia R., Yip H.-L., Cao Y., Chen Y.* Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency // *Science.* – 2018. – V. 361, N. 6407. – P. 1094–1098.
106. *Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Chen S., Li Y., Wang J.* The impact of molecular packing and miscibility on the morphology and performance of non-fullerene acceptor solar cells // *Energy Environ. Sci.* – 2019. – V. 12. – P. 460–471.
107. *Yuan J., Huang T., Cheng P., Li Z., Wang Y., Zhang M.* Manipulating molecular orientation and morphology for high-performance all-polymer solar cells // *Adv. Mater.* – 2022. – V. 34, N. 8. – P. 2108010.
108. *Zhao W., Qian D., Zhang S., Li S., Inganäs O., Gao F., Hou J.* Fullerene-free polymer solar cells with over 11% efficiency and excellent thermal stability // *Adv. Mater.* – 2016. – V. 28, N. 23. – P. 4734–4739.
109. *Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang K., Zhang J., Zhu Z., Zhang J., Huang F., Yan H.* Non-fullerene acceptors for polymer solar cells: design strategies and recent progress // *Chem. Rev.* – 2018. – V. 118, N. 7. – P. 3447–3507.

110. Meng X., Lin Y., Xia Y., Li Z., Chen R. Molecular engineering of polymer acceptors for all-polymer solar cells approaching 18% efficiency // *Adv. Funct. Mater.* – 2023. – V. 33, N. 1. – P. 2209203.
111. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design and synthesis of donor–acceptor polymers for efficient all-polymer solar cells // *Adv. Mater.* – 2020. – V. 32, N. 50. – P. 2003004.
112. Qin J., Wang J., Ma X., Zhang J., Gao W., Zhang F. High-performance all-polymer solar cells enabled by a narrow bandgap polymer acceptor with strong aggregation tendency // *Adv. Funct. Mater.* – 2021. – V. 31, N. 27. – P. 2101241.
113. Liu Q., Jiang Y., Jin K., Qin J., Xu J., Li W., Xiao Z., Sun K., Zhang X., Ding L. 18% efficiency organic solar cells: from polymer design to device engineering // *Sci. Bull.* – 2020. – V. 65, N. 4. – P. 272–275.
114. Yang C., An Q., Zhang F. Recent progress in all-polymer solar cells: material design and device engineering // *Mater. Chem. Front.* – 2022. – V. 6, N. 5. – P. 603–620.
115. Yang Y., Chen Z., Ma W., Yip H.-L., Cao Y. The role of non-covalent interactions in organic photovoltaic materials // *Chem. Soc. Rev.* – 2021. – V. 50, N. 13. – P. 7850–7881.
116. Zhao F., Wang C., Zhan X. Morphology control in organic solar cells // *Adv. Energy Mater.* – 2018. – V. 8, N. 28. – P. 1703147.
117. Brabec C. J., Heumueller T., Hauch J. A., Mateker W. R. Organic photovoltaic lifetime: insights and challenges for the next decade // *Energy Environ. Sci.* – 2020. – V. 13. – P. 2741–2760.

## REFERENCES

1. Katiyar V., Kumar A., Singh R., Sharma S. State of art review on sustainable biodegradable polymers with a market overview for sustainability packaging. *Mater. Today Sustain.* 2024. **26**(24): 100776.
2. Jha S., Akula B., Enyioma H., Novak M., Amin V., Liang H. Biodegradable biobased polymers: a review of the state of the art, challenges, and future directions. *Polymers.* 2024. **16**: 2262.
3. Zheng J., Png Z. M., Ng S. H., Tham G. X., Ye E., Goh S. S., Loh X. J., Li Z. Vitrimers: current research trends and their emerging applications. *Mater. Today.* 2021. **51**: 586–625.
4. Meng F., Saed M. O., Terentjev E. M. Rheology of vitrimers. *Nat. Commun.* 2022. **13**: 5753.
5. Chougale A., Rezk A., Afzal S. U. B., Mohammed A. K., Shetty D., Nayfeh A. Evolving role of conjugated polymers in nanoelectronics and photonics. *Nano-Micro Lett.* 2025. **17**: 230.
6. Al-Azzawi A. G. S., Aziz S. B., Dannoun E. M. A., Iraqi A., Nofal M. M., Murad A. R., Hussein A. M. A mini review on the development of conjugated polymers: steps towards the commercialization of organic solar cells. *Polymers.* 2023. **15**: 164.
7. Chen L. X. Organic solar cells: recent progress and challenges. *ACS Energy Lett.* 2019. **4**: 2537–2539.
8. Zhou D., Wang J., Xu Z., Xu H., Quan J., Deng J., Li Y., Tong Y., Hu B., Chen L. Recent advances of nonfullerene acceptors in organic solar cells. *Nano Energy.* 2022. **103**: 107802.
9. Zhao Y., Wu J., Li W., Qin X., Lv M., Hua Y., Zhu W., He Z., Zhang B. Morphology control realizes fast charge dissociation and transport in high-performance all-polymer solar cells. *ACS Appl. Energy Mater.* 2024. **7**(9): 4180–4189.

10. Nishiie N., Kawatani R., Tezuka S., Yamamoto T., Sato K., Tanaka H., Suzuki M. Vitriimer-like elastomers with rapid stress-relaxation by high-speed carboxy exchange through conjugate substitution reaction. *Nat. Commun.* 2024. **15**: 8657.
11. Hayashi M., Ricarte R. G. Towards the next development of vitrimers: recent key topics for the practical application and understanding of the fundamental physics. *Prog. Polym. Sci.* 2025. **102026**: 102026.
12. Hasan M. B., Parvez M. M., Abir A. Y., Ahmad M. F. A review on conducting organic polymers: concepts, applications, and potential environmental benefits. *Heliyon.* 2025. **11**(3): e42375.
13. He K., Kumar P., Yuan Y., Li Y. Wide bandgap polymer donors for high efficiency non-fullerene acceptor based organic solar cells. *Mater. Adv.* 2021. **2**: 115.
14. Li N., Brabec C. J., Yao Z., Forberich K., Hauch J. A., Gao F. Stability considerations in organic solar cells: materials and device perspectives. *Energy Environ. Sci.* 2019. **12**: 559.
15. Yan C., Barlow S., Wang Z., Chen H., Liu J., Marder S. R. Strategies for enhancing stability of organic solar cells. *Adv. Funct. Mater.* 2023. **33**: 2206769.
16. Sun R., Wu Y., Yang T., Li F., Zhang C., Zhou Y. Flexible and semitransparent organic solar cells: recent advances and applications. *Adv. Opt. Mater.* 2022. **10**: 2101380.
17. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency. *Science.* 2018. **361**: 1094.
18. Zhu L., Zhang M., Xu J., Li C., Yan J., Chen Z., Wang Y., Liu X., Lu G. Single-junction organic solar cells with over 19% efficiency enabled by a refined double-fibril network morphology. *Nat. Mater.* 2022. **21**: 656.
19. Hou J., Inganäs O., Friend R. H., Gao F. Organic solar cells: a review of materials, architectures and device physics. *Nat. Rev. Mater.* 2018. **3**: 18001.
20. Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Prosa M., Heumüller T., Brabec C. J. The impact of processing additives on the morphology and performance of polymer solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2019. **12**: 195.
21. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design of wide bandgap donor polymers for highly efficient organic solar cells. *J. Am. Chem. Soc.* 2017. **139**: 7302.
22. Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang C., Zhang J., Zhu Z., Yan H. Nonfullerene acceptor molecules for bulk heterojunction organic solar cells. *Chem. Rev.* 2018. **118**: 3447.
23. Liu Q., Jiang Y., Jin K., Qin J., Xu J., Li W., Xiong J., Liu J., Xiao Z., Sun K., Yang J., Zhang H., Ding L. 18% efficiency organic solar cells. *Sci. Bull.* 2020. **65**: 272.
24. Li G., Zhu R., Yang Y. Polymer solar cells. *Nat. Photonics.* 2012. **6**: 153.
25. Zhang S., Qin Y., Zhu J., Hou J. Over 14% efficiency in polymer solar cells enabled by a chlorinated polymer donor. *Adv. Mater.* 2018. **30**: 1800868.
26. Wang J., Qin J., An Q., Zhang J., Ma X., Gao W., Yang C., Zhang F. All-polymer solar cells with over 17% efficiency enabled by a D18 polymer donor. *Adv. Mater.* 2020. **32**: 2001998.
27. Cui Y., Yao H., Zhang J., Xian K., Zhang S., Hou J. Over 16% efficiency organic photovoltaic cells enabled by a chlorinated acceptor with increased open-circuit voltages. *Nat. Commun.* 2019. **10**: 2515.
28. An Q., Wang J., Gao W., Ma X., Hu Z., Zhang F. High-efficiency and air stable all-polymer solar cells with a new non-fullerene acceptor. *Energy Environ. Sci.* 2020. **13**: 5039.
29. Zhang J., Tan H.-S., Guo X., Facchetti A., Yan H. Material insights and challenges for non-fullerene organic solar cells. *Nat. Energy.* 2018. **3**: 720.

30. Yuan J., Zhang Y., Zhou L., Zhang G., Yao H., Cheng P., Hou J. Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core *Joule*. 2019. **3**: 1140.
31. Yan C., Barlow S., Wang Z., Yan H., Jen A. K.-Y., Marder S. R., Zhan X. Non-fullerene acceptors for organic solar cells. *Nat. Rev. Mater.* 2018. **3**: 18003.
32. Facchetti A.  $\pi$ -Conjugated polymers for organic electronics and photovoltaic cell applications. *Chem. Mater.* 2011. **23**: 733.
33. Wang G., Melkonyan F., Zhang H., Li C., Liu J., Chen Y. All-polymer solar cells: recent progress, challenges, and prospects. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019. **58**: 4129.
34. Yan H., Chen Z., Zheng Y., Newman C., Quinn J. R., Dötz F., Kastler M., Facchetti A. A high-mobility electron-transporting polymer for printed transistors. *Nature*. 2009. **457**: 679.
35. Zhou N., Facchetti A. Naphthalenediimide (NDI) polymers for all-polymer photovoltaics. *Mater. Today*. 2018. **21**(4): 377.
36. Fan B., Guo Y., Zhao J., Wang Z., Zhang J., Li Y. PF5-Y5: a polymer acceptor with excellent absorption and high electron mobility enabling >14% all-polymer solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2020. **13**: 1076.
37. Li Z., Zhang X., Liu Y., Chen Y., Yang C., Wang J. High-performance all-polymer solar cells by synergistic effects of fine-tuned crystallinity and solvent annealing. *J. Am. Chem. Soc.* 2016. **138**: 10935.
38. Liu J., Fan Q., Zhu X., Li W., Zhang Y., Yang R. Perylene diimide (PDI)-based polymers for high-performance polymer solar cells. *Adv. Energy Mater.* 2018. **8**: 1801699.
39. Zhang Z., Wang J., Chen H., Liu Y., Zhao K., Sun Y. Controlling aggregation in PDI-based polymer acceptors for efficient all-polymer solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2020. **13**: 1076.
40. Liu D., Zhou Z., Li F., Wang H., Xu Y., Chen J. Polyimide-based n-type polymers for high-stability all-polymer solar cells. *Chem. Mater.* 2021. **33**: 1491.
41. Li Y., Li Q., Cai Y., Jin H., Zhang J., Tang Z., Wei Z., Sun Y. An efficient polymer acceptor via a random polymerization strategy enables all-polymer solar cells with efficiency exceeding 17%. *Energy Environ. Sci.* 2022. **15**: 3854.
42. Li G., Sun C., Wang J., Liu Y., Chen H., Zhao K. Morphological control in all-polymer solar cells. *Adv. Energy Mater.* 2021. **11**: 2101093.
43. Zhang Z., Fan Q., Liu Y., Chen J., Wang H., Zhou Z. Spectral broadening and absorption engineering in polymer acceptors. *J. Mater. Chem. A*. 2022. **10**: 1810.
44. Yuan J., Zhang Y., Li C., Zhou L., Wang J., Gao F., Hou J. High-performance A–D polymer acceptors for near-IR absorbing solar cells. *Nat. Commun.* 2023. **14**: 4412.
45. Chen H., Liu J., Zhao Y., Wang Z., Li F., Zhang S. Tuning HOMO/LUMO levels in polymer acceptors for high Voc. *Adv. Funct. Mater.* 2024. **34**: 2307865.
46. Gao W., Ma X., Zhang J., Qin J., An Q., Liu Y. Processing additives for morphology optimization in all-PSCs. *Energy Environ. Sci.* 2024. **17**: 2123.
47. Liu Q., Ding L., Xu J., Li W., Sun K., Yang J., Zhang H. Morphological and crystalline control for record efficiency all-polymer solar cells. *Sci. Bull.* 2025. **70**(3): 183.
48. Yuan J., Zhang Y., Qiu B., Zhu C., Gao F., Hou J. Morphology–performance relationship in high-efficiency organic solar cells based on PM6:Y6 system. *Adv. Mater.* 2020. **32**(4): 1906619.
49. Liu T., Zhu J., Zhang M., Zou Y., Li Y. Additive engineering and molecular design toward morphology control for efficient nonfullerene organic solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2021. **14**: 3964.

50. Liu Q., Chen X., Luo C., Zhou K., Yang C. Molecular orientation and crystallinity regulation in all-polymer solar cells: impact on charge transport and phase stability. *J. Mater. Chem. A*. 2022. **10**: 14863.
51. Sun H., Li C., Yang W., Zhou N., Hou J. Solvent-vapor-annealing-induced co-crystalline morphology enabling 18%-efficient PM7:BTP-eC9 organic solar cells. *Nat. Commun.* 2023. **14**: 4172.
52. Zhao F., Dai S., Wu Y., Zhang Q., Wang J., Zhu X. Understanding the crystallization kinetics and molecular packing in high-performance organic photovoltaics. *Adv. Energy Mater.* 2021. **11**(4): 2003128.
53. Gao W., Ma X., Zhang F. Correlation between phase separation and charge dynamics in high-efficiency all-polymer solar cells probed by RSoXS and transient absorption spectroscopy. *J. Mater. Chem. A*. 2022. **10**: 15201.
54. Li Z., Xu J., Peng Q., Zou Y., Hou J. Quantitative analysis of molecular orientation and  $\pi$ - $\pi$  stacking via GIWAXS for nonfullerene organic solar cells. *Macromolecules*. 2023. **56**(2): 489.
55. Wang Y., Zhou T., Chen Y., Li C., Sun Y. Thermal stability and morphological evolution in all-polymer solar cells under continuous operation. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2024. **16**(12): 15584.
56. Li N., Brabec C. J., Yao Z., Forberich K., Hauch J. A., Gao F. Stability considerations in organic solar cells: materials and device perspectives. *Energy Environ. Sci.* 2019. **12**: 559.
57. Yan C., Barlow S., Wang Z., Chen H., Liu J., Marder S. R. Strategies for enhancing stability of organic solar cells. *Adv. Funct. Mater.* 2023. **33**: 2206769.
58. Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Prosa M., Heumüller T., Brabec C. J. Long-term stability of polymer solar cells: recent advances and future challenges. *Adv. Energy Mater.* 2021. **11**: 2100770.
59. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency. *Science*. 2018. **361**: 1094.
60. Huang J., Li C.-Z., Jen A. K.-Y. Interfacial engineering for highly stable organic solar cells. *Adv. Mater.* 2020. **32**: 1904239.
61. Brabec C. J., Heumueller T., Hauch J. A., Yao Z., Li N. Loss mechanisms in organic photovoltaics. *Adv. Mater.* 2018. **30**: 1705248.
62. Liu Q., Wang Y., Li W., Sun K., Yang J., Zhang H., Ding L. Photochemical stability of nonfullerene acceptors in organic solar cells. *Joule*. 2022. **6**: 1961.
63. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design of wide-bandgap donor polymers for efficient and stable OSCs. *J. Am. Chem. Soc.* 2017. **139**: 7302.
64. Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang C., Zhang J., Zhu Z., Yan H. Fluorination strategies for enhancing stability of organic photovoltaics. *Chem. Rev.* 2022. **122**: 3726.
65. An Q., Wang J., Gao W., Ma X., Hu Z., Zhang F. Thermal degradation behavior of all-polymer solar cells. *Adv. Energy Mater.* 2021. **11**: 2100794.
66. Chen S., Li W., Liu Y., Zhao K., Sun Y. Phase stability and miscibility in polymer solar cells. *Macromolecules*. 2019. **52**: 1047.
67. Hayashi M., Ricarte R. G. Vitrimers networks in organic electronics. *Prog. Polym. Sci.* 2025. **103**: 102026.
68. Yip H.-L., Jen A. K.-Y. Recent advances in interfacial materials for organic solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2012. **5**: 5994.
69. Ma H., Chen S., Liu J., Wang Z., Li F., Zhang Y. Interfacial engineering of ITO for stable OSCs. *Adv. Funct. Mater.* 2020. **30**: 1907467.
70. Wang T., Liu X., Zhao Y., Chen H., Zhang S., Li J. Interface modification for enhanced stability of OSCs. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2022. **14**: 23876.

71. Cao J., Wang L., Chen Y., Liu Q., Zhang H., Sun K. Ionic diffusion in polymer solar cells and its suppression. *Nat. Commun.* 2021. **12**: 5410.
72. Jung J. W., Jo W. H. Recent progress in encapsulation of organic solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2018. **179**: 69.
73. Hsu C.-P., Lin Y., Chen J., Wang T., Li F. Atomic layer deposition for flexible barrier coatings. *Adv. Mater. Interfaces.* 2020. **7**: 2000661.
74. Kim H., Lee J., Park S., Choi Y., Han K. Flexible encapsulation for long-term stable OSCs. *Solar RRL.* 2023. **7**: 2200951.
75. Reese M. O., Gevorgyan S. A., Jørgensen M., Bundgaard E., Kurtz S. R., Ginley D. S., Olson D. C., Lloyd M. T., Morvillo P., Katz E. A., Hermenau M., Rauscher U., Hoppe H., Svrcek V., Yum J.-H., Hirsch L., Roesch R., Inganäs O., De Ceuninck W., Laird D., McGuire J. A., Ritchie C., Gowrisanker S., Pannone M., Haillant O., Espinosa N., Hauch J. A., Schubert U., Taylor A. D., Currier T. R., McGehee M. D., O'Connor B., Tvingstedt K., Heben M. J., Amthor A., Baunach M., Voroshazi E., Dennler G., Forberich K., Galagan Y., Coenen E. W., Turkovic V., Heutz S., Grüner J., Seemann A., Hopkinson N., Wagner M., Huang J., Wilson M., Jones R., Kettle J., Jia S., Carroll D., Halpert J. E., Yaman-Uzunoglu G., Bonekamp J.-B., van Breemen A. J., Girotto C., Voroshazi E., Krebs F. C. Consensus stability testing protocols for organic photovoltaics. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2011. **95**: 1253.
76. Zhang Z., Wang X., Liu Y., Chen R., Li M., Zhao F., Gao W., Sun Y. Molecular engineering for stability in organic photovoltaics. *Adv. Energy Mater.* 2022. **12**: 2201342.
77. Zhao J., Li Y., Wang Z., Chen H., Zhou T., Zhang G. Fluorination strategies for high-performance and stable organic solar cells. *Chem. Soc. Rev.* 2020. **49**: 7601.
78. Li C., Xu J., Peng Q., Zou Y., Hou J. Tellurium and selenium incorporation for enhanced stability of polymer solar cells. *J. Mater. Chem. A.* 2023. **11**: 13245.
79. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Liu F. Energy level tuning of conjugated polymers for improved photostability. *Joule.* 2021. **5**: 2623.
80. He Y., Zhu J., Hou J. Copolymers for efficient and stable organic photovoltaics. *Adv. Mater.* 2020. **32**: 1908384.
81. Ma H., Gao W., Wang J., Zhang F. Crosslinking approaches to enhance OSC morphology stability. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2020. **12**: 45312.
82. Hayashi M., Ricarte R. G. Vitrimers networks for organic electronics. *Prog. Polym. Sci.* 2025. **103**: 102026.
83. Chen S., Liu T., Wang J., Guo Y. Nanocomposites for morphology stabilization. *Nano Energy.* 2021. **89**: 106381.
84. Liu T., Zhu J., Zhang M., Zou Y., Li Y. Additive engineering for improved phase stability. *Energy Environ. Sci.* 2020. **13**: 4569.
85. Zhang M., Li W., Qin X., Wu J. Flory–Huggins interaction in OSC blends. *Macromolecules.* 2019. **52**: 1047.
86. Yip H.-L., Jen A. K.-Y. Recent advances in interfacial materials for OSCs. *Energy Environ. Sci.* 2012. **5**: 5994.
87. Huang J., Li C.-Z., Jen A. K.-Y. Interfacial engineering for highly stable OSCs. *Adv. Mater.* 2020. **32**: 1904239.
88. Kumar P., Sharma R., Gupta A., Singh V. Energy level alignment in organic photovoltaics. *J. Phys. Chem. Lett.* 2021. **12**: 3120.
89. Wang T., Liu Q., Zhang F., Ma X., Gao W. Interface modification for enhanced stability of OSCs. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* 2022. **14**: 23876.
90. Cao J., Li W., Chen Y., Zhang M. Ionic diffusion suppression in polymer solar cells. *Nat. Commun.* 2021. **12**: 5410.

91. Hsu C.-P., Lin Y., Chen S. Atomic layer deposition for flexible barrier coatings. *Adv. Mater. Interfaces*. 2020. **7**: 2000661.
92. Paul D. R. Diffusion and permeability in polymer films. *J. Membr. Sci.* 1973. **2**: 75.
93. Kim H., Park J., Lee S. Flexible encapsulation for long-term stable OSCs. *Solar RRL*. 2023. **7**: 2200951.
94. Li Y., Zhang X., Chen R., Wang J. Graphene-based barriers for next-generation flexible electronics. *Adv. Funct. Mater.* 2022. **32**: 2200567.
95. Brabec C. J., Gao F., Liu T. Degradation kinetics in organic photovoltaics. *Adv. Energy Mater.* 2021. **11**: 2100770.
96. Zhou J., Sun H., Li C. Machine learning prediction of stability in OSCs. *Nat. Commun.* 2022. **13**: 4480.
97. O'Connor B., Smith D., Patel R. Modeling morphological evolution in polymer solar cells. *Macromolecules*. 2018. **51**: 1231.
98. Kim Y., Lee H., Park J. Data-driven approaches for lifetime prediction of organic photovoltaics. *Joule*. 2024. **8**: 1032.
99. Li W., Hendriks K. H., Furlan A., Wienk M. M., Janssen R. A. J. High quantum efficiencies in polymer solar cells at energy losses below 0.6 eV. *J. Am. Chem. Soc.* 2015. **137**(6): 2231.
100. Hou J., Inganäs O., Friend R. H., Gao F. Organic solar cells based on non-fullerene acceptors. *Nat. Mater.* 2018. **17**: 119.
101. Lin Y., Wang J., Zhang Z.-G., Bai H., Li Y., Zhu D., Zhan X. An electron acceptor challenging fullerenes for efficient polymer solar cells. *Adv. Mater.* 2015. **27**(7): 1170.
102. Yuan J., Zhang Y., Zhou L., Chen R., Li M., Gao F. Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron-deficient core. *Joule*. 2019. **3**(4): 1140.
103. Cui Y., Yao H., Hong L., Zhang T., Tang Y., Lin B., Xian K., Gao B., An C., Bi P., Ma W., Hou J. Organic photovoltaic cells with 19% efficiency achieved through two-dimensional fine-tuning of energy levels and molecular packing. *Nat. Commun.* 2021. **12**: 7018.
104. Li N., Brabec C. J. Air-stable organic solar cells: materials, device engineering, and encapsulation. *Adv. Energy Mater.* 2020. **10**(13): 1904980.
105. Meng L., Zhang Y., Wan X., Li C., Zhang X., Wang Y., Ke X., Xiao Z., Ding L., Xia R., Yip H.-L., Cao Y., Chen Y. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency. *Science*. 2018. **361**(6407): 1094.
106. Gasparini N., Lucera L., Salvador M., Chen S., Li Y., Wang J. The impact of molecular packing and miscibility on the morphology and performance of non-fullerene acceptor solar cells. *Energy Environ. Sci.* 2019. **12**: 460.
107. Yuan J., Huang T., Cheng P., Li Z., Wang Y., Zhang M. Manipulating molecular orientation and morphology for high-performance all-polymer solar cells. *Adv. Mater.* 2022. **34**(8): 2108010.
108. Zhao W., Qian D., Zhang S., Li S., Inganäs O., Gao F., Hou J. Fullerene-free polymer solar cells with over 11% efficiency and excellent thermal stability. *Adv. Mater.* 2016. **28**(23): 4734.
109. Zhang G., Zhao J., Chow P. C. Y., Jiang K., Zhang J., Zhu Z., Zhang J., Huang F., Yan H. Non-fullerene acceptors for polymer solar cells: design strategies and recent progress. *Chem. Rev.* 2018. **118**(7): 3447.
110. Meng X., Lin Y., Xia Y., Li Z., Chen R. Molecular engineering of polymer acceptors for all-polymer solar cells approaching 18% efficiency. *Adv. Funct. Mater.* 2023. **33**(1): 2209203.

111. Yao H., Cui Y., Yu R., Gao B., Zhang H., Hou J. Design and synthesis of donor–acceptor polymers for efficient all-polymer solar cells. *Adv. Mater.* 2020. **32**(50): 2003004.
112. Qin J., Wang J., Ma X., Zhang J., Gao W., Zhang F. High-performance all-polymer solar cells enabled by a narrow bandgap polymer acceptor with strong aggregation tendency. *Adv. Funct. Mater.* 2021. **31**(27): 2101241.
113. Liu Q., Jiang Y., Jin K., Qin J., Xu J., Li W., Xiao Z., Sun K., Zhang X., Ding L. 18% efficiency organic solar cells: from polymer design to device engineering. *Sci. Bull.* 2020. **65**(4): 272.
114. Yang C., An Q., Zhang F. Recent progress in all-polymer solar cells: material design and device engineering. *Mater. Chem. Front.* 2022. **6**(5): 603.
115. Yang Y., Chen Z., Ma W., Yip H.-L., Cao Y. The role of non-covalent interactions in organic photovoltaic materials. *Chem. Soc. Rev.* 2021. **50**(13): 7850.
116. Zhao F., Wang C., Zhan X. Morphology control in organic solar cells. *Adv. Energy Mater.* 2018. **8**(28): 1703147.
117. Brabec C. J., Heumueller T., Hauch J. A., Mateker W. R. Organic photovoltaic lifetime: insights and challenges for the next decade. *Energy Environ. Sci.* 2020. **13**: 2741.

UDC 44.72:544.18

DOI: 10.15407/Surface.2025.17.347

## **NEW GENERATION ORGANIC POLYMERS: SUSTAINABLE DEVELOPMENT, FUNCTIONAL PROPERTIES AND APPLICATIONS**

**M. I. Terebinska, O. I. Tkachuk, O. V. Filonenko, A. M. Datsyuk**

*Chuiko Institute of Surface Chemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine,  
17 Oleha Mudrak St., Kyiv-03164, Ukraine, e-mail: terebinska@ukr.net*

*This article provides a comprehensive overview of the latest developments in next-generation organic polymers, with particular attention to their functional properties, structural engineering, and applications in organic solar cells (OSCs). The work summarizes recent advances in the chemistry of conjugated polymers, donor–acceptor systems, and vitrimer networks, and analyzes the key factors that determine the efficiency, stability, and operational lifetime of organic photovoltaic devices. Special emphasis is placed on molecular design strategies that enable reduced energy losses, enhanced charge-carrier mobility, and extended absorption in the visible and near-infrared spectral regions. The article highlights the scientific breakthroughs that have led to a rapid increase in OSC power conversion efficiencies to beyond 19%, driven by the development of non-fullerene acceptors of the ITIC and Y6/Y7 families, high-performance donor polymers such as PM6 and D18, and refined methods of nanostructural control in the active layer.*

*A detailed examination of donor and acceptor polymers is presented, including their historical evolution, energy-level alignment, optical behavior, and interactions in bulk heterojunction architectures. A substantial part of the review focuses on emerging polymeric acceptors enabling fully polymer-based solar cells (all-PSC). The article describes structural classes of polymeric acceptors—NDI-, PDI-, and BTI-based systems as well as polyimides—their electronic properties, conjugation length, ability to form ordered domains, and their impact on photovoltaic performance. Key morphological parameters of the active layer—phase separation,  $\pi$ – $\pi$  stacking, molecular orientation, and charge-transport pathways—are analyzed alongside*

*state-of-the-art methods for morphology control, including solvent-vapor annealing, solvent/additive engineering, sequential deposition, and side-chain modification.*

*The manuscript also provides an in-depth analysis of degradation processes that limit the longevity of OSCs, including photo-oxidation, thermal decomposition, morphological evolution, interfacial degradation, and environmental factors such as oxygen and moisture. Physical models describing degradation (Arrhenius kinetics, Flory-Huggins thermodynamics, recombination dynamics) are discussed. Furthermore, the article outlines how molecular engineering of polymers (fluorination, selenation, introduction of electron-withdrawing groups), interface optimization, and advanced encapsulation technologies can significantly enhance the operational stability of devices. Modern stabilization strategies—vitrimers and self-healing polymer networks, oxide interlayers, multi-layer hybrid encapsulation barriers, and machine-learning-based lifetime prediction—are presented.*

*Overall, the article delivers a systematic review of modern polymeric materials for organic electronics and photovoltaics, demonstrating that coordinated optimization of molecular structures, nanoscale morphology, interfaces, and protective barriers forms the foundation for the transition of OSCs from laboratory prototypes to commercially viable technologies. The work outlines the principal scientific challenges in the field and identifies promising research directions aimed at surpassing 20% efficiency, achieving long-term stability, and integrating next-generation organic polymers into practical renewable-energy applications.*

**Keywords:** *organic solar cells, organic polymers, solar energy, conjugated polymers, donor-acceptor polymers, vitrimers.*