

W dobie dynamicznie rozwijającej się ekonomii oraz rosnącej światowej populacji, dekarbonizacja sektora energetycznego jest jednym z największych wyzwań XXI wieku w kontekście ograniczania zmian klimatu. Przewiduje się, że w 2050 r. odnawialne źródła energii będą odgrywały zasadniczą rolę w procesie transformacji sektora energetycznego, zaspokajając 86% światowego zużycia energii. Spośród wszystkich znanych odnawialnych źródeł energii, światło słoneczne ma zdecydowanie największy teoretyczny potencjał. W ciągu półtorej godziny, na powierzchnię Ziemi dociera więcej energii słonecznej niż wyniosło globalne zużycie energii w 2001 r. pochodzącej ze wszystkich źródeł łącznie. Tak ogromny potencjał energii słonecznej stał się wielką siłą napędową dla badań nad fotowoltaiką w ciągu ostatnich 50 lat. Badania te zaowocowały intensywnym rozwojem nowych technologii oraz znaczną poprawą wydajności ogniw słonecznych.

Pomimo niezwykle dynamicznego rozwoju technologii, wszystkie standardowe jednozłączowe ogniwa słoneczne charakteryzują się tymi samymi podstawowymi mechanizmami strat ograniczającymi ich teoretyczną wydajność do 33% (tzw. Shockley-Queisser limit). Główną stratę (ok. 30%) można przypisać termalizacji, czyli utracie nadmiaru energii powyżej przerwy energetycznej ogniwa słonecznego, po pochłonięciu wysokoenergetycznego fotonu. Badania teoretyczne przewidują, że wykorzystanie rozszczepienia singletowego w ogniwach słonecznych może zwiększyć ich teoretyczną maksymalną wydajność nawet do 45%. Rozszczepienie singletowe to proces fotofizyczny, w którym cząsteczki wzbudzone po absorpcji jednego wysokoenergetycznego fotonu, ewoluują do dwóch trypletowych stanów wzbudzonych, które można wyekstrahować jako dwa elektrony. Zastosowanie rozszczepienia singletów na dużą skalę w fotowoltaice wymaga gruntownego zrozumienia tego procesu, co było motorem wielu badań mechanistycznych w ostatniej dekadzie. Pomimo tego, niektóre istotne pytania wciąż pozostają bez odpowiedzi, np. jaki jest wpływ układu międzycząsteczkowego w trzech wymiarach; jak efektywnie zbierać tryplety powstałe w wyniku rozszczepienia singletów; jaka jest rola konformacji i wibracji; lub jak entropia aktywuje formowanie się wysokoenergetycznych trypletów.

Odpowiedzi na najważniejsze pytania, dotyczące rozszczepienia singletów, wymagają opracowania nowych architektur molekularnych. W niniejszym projekcie proponujemy trzy strategie molekularne zaprojektowane w sposób, umożliwiający uzyskanie odpowiedzi na niektóre spośród pozostałych pytań. Są one niezbędne do pełnego zrozumienia relacji pomiędzy strukturą a właściwościami substancji, ważnych dla zaprojektowania materiałów idealnych dla rozszczepienia singletowego. W pierwszych dwóch strategiach skoncentrujemy się na systematycznych badaniach nad zależnością pomiędzy odległością międzycząsteczkową a wydajnością rozszczepienia singletowego. Zbadanie tych zależności jest niezwykle istotne, ponieważ pomoże precyzyjnie zaprojektować właściwości materiału w dużej skali. W trzeciej ścieżce badawczej planujemy się skoncentrować na delokalizacji stanów wzbudzonych, powstałych w wyniku rozszczepienia singletów, a tym samym na udziale entropii w aktywacji endotermicznego rozszczepienia singletu. Jest to bardzo ważny temat, z uwagi na to, że aktywacja entropiczna może umożliwić zbieranie wysokoenergetycznych trypletów, dzięki czemu rozszczepienie singletowe stanie się kompatybilne z szeroko stosowanymi krzemowymi ogniwami słonecznymi.

Zaproponowane struktury zostaną zsyntetyzowane i wstępnie scharakteryzowane przez członków grupy projektowej w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie. Szczegółowe badania fotofizyczne zostaną przeprowadzone we współpracy z zespołami ekspertów ds. spektroskopii prof. Jacka Waluka z Instytutu Chemii Fizycznej PAN i prof. Dirka Guldiego z Uniwersytetu Friedricha Alexandra Erlangen-Nurnberg w Niemczech.