**Применение методов машинного обучения для дизайна гибридных 1D галогенометаллатов(III) с заданным значением ширины запрещённой зоны**

***Быков А.В., Шестимерова Т.А., Шевельков А.В.***

*Аспирант, 3 года обучения*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail* *bykov.andrey.sw@gmail.com*

Несмотря на преодоление эффективности наиболее распространённых солнечных элементов на основе монокристаллического кремния (26.1 % [1]) устройствами, использующими гибридные галогенидные перовскиты свинца(II), (27.0  % [1]), перед дальнейшим развитием перовскитной фотовольтаики стоят две нерешённые проблемы – высокая токсичность Pb2+ и низкая стабильность подобных свинцовых соединений. В качестве альтернативы, лишённой отмеченных недостатков, рассматривают галогенидные комплексы висмута(III) и сурьмы(III) с органическими катионами. [2] Общая особенность органо-неорганических галогенометаллатов заключается в том, что строение анионной подструктуры определяет важнейшие физико-химические свойства, например, ширину запрещённой зоны (ШЗЗ), значение которой является первым критерием для отбора потенциальных светопоглощающих материалов (оптимально 1.1-1.5 эВ для одномодульных солнечных элементов и ~1.75 эВ для тандемных). [3] Катион же играет «структуронаправляющую» роль, определяя возможность образования конкретного типа галогенометаллатного аниона. При этом значительные успехи в установлении количественных соотношений «структура-свойство» (QSPR) были достигнуты для наиболее изученных 3D и 2D перовскитоподобных соединений свинца(II) [4], в то время как для нетоксичных и устойчивых галогенометаллатов(III) не определены ни корреляции «структура-свойство», ни взаимосвязь между природой катиона и образующимся типом анионной подструктуры.

В данной работе мы представляем решение задачи QSPR по предсказанию ширины запрещенной зоны (ШЗЗ) органо-неорганических галогеновисмутатов(III) и галогеноантимонатов(III) с анионной подструктурой типа α-{MHal4}- (M = Bi, Sb; Hal = I, Br) и собственные подходы, позволяющие определить круг органических катионов, образующих α-{MHal4}-. Основываясь на кристаллографических данных в собранном датасете из 238 структур, мы провели исследование возможных пространств дескрипторов (длины связей M–Hal, углы Hal–M–Hal, показатели степени искажения октаэдров MHal6, расстояния Hal···Hal) для решения задачи QSPR. Нами среди ряда моделей машинного обучение (MLR, SVR, GPR, RF, XGB) для разных пространств признаков отобраны модели с наилучшим качеством (значения RMSE <0.09 эВ), а также определена важность дескрипторов. Показано, что образование анионной подструктуры типа α-{MHal4}- наиболее характерно для диаммониевых катионов и ароматических моноаммониевых катионов без дополнительных функциональных групп.

*Работа выполнена при поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования "Интеллект".*

**Литература**

1. NREL. Best Research-Cell Efficiency Chart [Electronic resource]. 2022. URL: https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html.

2. Attique S., Ali N., Ali S., Khatoon R., Li N., Khesro A., Rauf S., Yang S., Wu H. A Potential Checkmate to Lead: Bismuth in Organometal Halide Perovskites, Structure, Properties, and Applications // Adv. Sci. 2020. Vol. 7. No. 13. P. 1903143.

3. Sun J., Wu J., Tong X., Lin F., Wang Y., Wang Z.M. Organic/inorganic metal halide perovskite optoelectronic devices beyond solar cells // Adv. Sci. 2018. Vol. 5. No. 5, P. 1700780.

4. Chen J., Feng M., Zha C., Shao C., Zhang L., Wang L. Machine learning-driven design of promising perovskites for photovoltaic applications: A review // Surf. Interfaces. 2022. Vol. 35. P. 102470.