

## АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание степени доктора философии (PhD)  
8D05302 – Физика

РОЖКОВА КСЕНИЯ СЕРГЕЕВНА

### **Структурные, оптические и электротранспортные свойства пленок PEDOT:PSS в полимерных солнечных элементах**

**Актуальность темы.** В настоящее время наибольший интерес среди различных научных международных сообществ вызывают недорогие, экологически чистые и гибкие органические солнечные фотопреобразователи, значение КПД которых уже превышает 14% даже для простой архитектуры с одним активным слоем и двумя компонентами. Разработка таких OSC имеет важное значение для сохранения глобальной окружающей среды и обеспечения устойчивого экономического роста.

Конструкция типичного солнечного элемента представляет собой фотоактивный слой в котором электронно-донорный и акцепторный материалы размещены в едином слое, образуя объемный гетеропереход, который способствует диссоциации экситонов на свободные заряды. Для уменьшения рекомбинации зарядов на границах раздела и повышения эффективности инжекции заряда фотоактивный слой располагают между электронным и дырочным транспортными слоями (ETL и HTL, соответственно).

Производительность органических фотопреобразователей сильно зависит от качества транспортных слоев ETL и HTL. К их функциональным свойствам предъявляются строгие требования, такие как как гибкость, низкое последовательное сопротивление, высокий коэффициент пропускания света в диапазоне видимого света и термическая стабильность. В качестве HTL материалов для OSC значительное распространение получили неорганические оксиды переходных металлов. Однако использование технологии вакуумного нанесения и осаждения из паровой фазы является дорогостоящим процессом, поэтому это ограничивает их использование. В настоящее время значительные усилия профильных лабораторий в мире направлены на поиск относительно дешевых в массовом производстве, прозрачных в видимой области спектра и термически стабильных проводящих материалов. Среди существующих в настоящее время HTL материалов для органических фотопреобразователей следует выделить композит поли(3,4-этилендиокситиофена) и кислоты полистиролсульфоната (PEDOT:PSS), который выделяется простотой обработки, низкой стоимостью, нетоксичностью и химической стабильностью.

В тоже время наличие объемных и поверхностных дефектов вблизи границы раздела PEDOT:PSS/фотоактивный слой является одной из причин низкой производительности OSC. Это приводит к усилению рекомбинации

зарядов на границе раздела, ухудшению транспорта дырок и снижению эффективности экстракции дырок электродом. Для решения этих проблем в настоящее время используют различные объемные и поверхностные модификации PEDOT:PSS с использованием растворителей, поверхностно-активных веществ, кислот а также использованием различных добавок. Это способствует оптимизации структуры и электрических свойств пленок PEDOT:PSS, улучшению межслойного контакта и улучшению стабильности и производительности OSC.

**Целью** диссертационного исследования является исследование влияния модификации структуры пленок PEDOT:PSS на фотовольтаические характеристики полимерных солнечных элементов.

**Объектами исследования** являются пленки PEDOT:PSS, наноленты фталоцианина и его металлокомплексов, наночастицы дисульфида вольфрама, полимерные солнечные элементы.

**Научная новизна** включает следующее:

1. Установлено влияние температуры кипения спиртов на ослабление связей между PEDOT и PSS. Показано, что в зависимости от температуры кипения спиртов формируются гомогенные пленки PEDOT:PSS с низкой степенью шероховатости, улучшенной объемной проводимостью и низким сопротивлением перехода на границе раздела с фотоактивным слоем.

2. Определена роль термического отжига в процессе формирования пленок PEDOT:PSS. Показано, что термический отжиг приводит к сглаживанию поверхностного интерфейса и уменьшению интенсивности спектра поглощения ароматического фрагмента PSS. Установлено, что термический отжиг приводит к уменьшению сопротивления пленки и возрастанию эффективности инжекции заряда, КПД и квантовой эффективности OSC.

3. Установлено, что примесь нанолент MPc в пленке PEDOT:PSS способствует уменьшению шероховатости и увеличению степени кристаллизации пленки. Показано, что легирование PEDOT:PSS нанолентами MPc приводит к снижению последовательного сопротивления и возрастанию эффективности OSC.

4. Установлено влияние наночастиц WS<sub>2</sub> на инжекцию и транспорт носителей заряда в PEDOT:PSS. Показано, что примеси наночастиц WS<sub>2</sub> способствуют уменьшению поверхностных дефектов в пленке, снижению межфазного сопротивления перехода носителей заряда и повышению эффективности работы OSC.

**Структура и объем диссертации.** Структура диссертационной работы определена поставленными задачами и состоит из введения, 4 разделов, заключения, библиографии и приложения. Она изложена на 103 страницах машинописного текста, иллюстрируется 47 рисунками, 17 таблицами, содержит список использованной литературы из 231 наименований.

**Основные результаты** включают следующее:

1. Спиртовые растворители и термический отжиг препятствуют образованию аггломератов, обогащенных PSS, что приводит к улучшению

транспорта дырок на границах PEDOT:PSS/фотоактивный слой и PEDOT:PSS/ITO.

2. Встраивание нанолент фталоцианина и его металлокомплексов в дырочно-транспортный слой PEDOT:PSS способствует улучшению кристалличности и уменьшению сопротивления пленки.

3. Существует критическая концентрация наночастиц  $WS_2$  в пленке PEDOT:PSS, превышение которой приводит к выталкиванию наночастиц на поверхность пленки, в результате наблюдается резкое увеличение межфазного сопротивления дырочно-транспортного слоя.

**Научно-практическая значимость работы:** разработана технология получения композитного дырочно-транспортного электрода OSC на основе PEDOT:PSS с высокими показателями стабильности и производительности; определены оптимальные параметры органической солнечной ячейки (структурные особенности, технология получения), обеспечивающие высокий показатель КПД и квантовой эффективности. Полученные результаты могут быть использованы при разработке фотовольтаических и оптоэлектронных ячеек, светоизлучающих диодов, в гибкой электронике и термоэлектрических устройств. Данная технология будет иметь перспективу для создания легких, технологичных и дешевых в массовом производстве автономных источников электроснабжения широкого круга электронных приборов и устройств.

**Апробация работы и публикации.** Основные результаты работы докладывались и обсуждались на конференциях: VIII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2022, посвященная 100-летию со дня рождения лауреата Нобелевской премии по физике Басова Николая Геннадиевича (Москва, 2022); XI Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Москва, 2022); XV Международная научная конференция «Физика твердого тела» (Астана, 2022); IV Международная научно-техническая конференция «Минские научные чтения-2021» (Минск, 2021); 5th International Symposium on Molecular Photonics dedicated to the memory of Academician A.N. Terenin (1896–1967) (St. Petersburg, 2021); X Международная конференция по фотонике и информационной оптике (Москва, 2021); Республиканская научно-практическая онлайн конференция, посвященная 85-летию видного ученого, первого декана физического факультета, доктора педагогических наук, профессора, академика Академии педагогических наук Казахстана Арынгазина Канапии Мубараковича (Караганда, 2021); VII Международная конференция «Лазерные, плазменные исследования и технологии» ЛаПлаз-2021 (Москва, 2021); Международная научно-практическая конференция «Ауэзовские чтения – 18: духовное наследие великого Абая» к 175-летию Абая Кунанбаева (Шымкент, 2020); The 8th International Conference on Nanomaterials and Advanced Energy Storage Systems INESS-2020 (Astana, 2020); Международная научно-практическая интернет-конференция «Инновационные технологии в системе физико-математического образования» (Минск, 2020).

**Публикации.** По результатам диссертационной работы опубликовано 18 печатных работ: 3 статьи в журналах, входящих в базы Thomson Reuters и Scopus (1 статья в *Polymers for Advanced Technologies*, 2021, IF – 3.348, Q2, процентиль – 79; 1 статья в *Optical Materials*, 2022, IF – 3.754, Q2, процентиль – 71; 1 статья в *Synthetic Metals*, IF – 4.0, Q2, процентиль – 84); 4 статьи в журналах, рекомендованных Комитетом по обеспечению качества в сфере науки и высшего образования МНВО РК и 11 публикаций в материалах международных и республиканских конференций.