

# **АННОТАЦИЯ**

8D05302-ФИЗИКА

Философия докторы (PhD) дәрежесіне іздену үшін ұсынылған диссертация

**АХАТОВА ЖАННУР ЖАНАРБЕКОВНА**

## **Органикалық жартылайөткізгішті нанокомпозиттеріндегі заряд тасушылардың тасымалдануы мен рекомбинациясы**

**Тақырыптың өзектілігі.** Үшінші буын фотоэлектрлік құрылғыларына жататын органикалық күн ұяшықтары (OSC) соңғы жылдары қарқынды дамып, құнының төмендігі, жеңілдігі, өндірісінің қарапайымдылығы және үлкен аумақтарда жасалу мүмкіндігі сияқты айтарлықтай артықшылықтарымен ерекшеленуде. Алайда құрылғылардың салыстырмалы түрде төмен пайдалы әсер коэффициенті (ПӘК) мен ұзақ мерзімді тұрақсыздығы олардың өнеркәсіптік өндірілуін және коммерциялануын шектейді. Белсендірілген қабаттардағы заряд тасымалдаушылардың төмен қозғалғыштығы, электронды-кемтікті рекомбинацияның жоғары деңгейі және күн сәулесінің жеткіліксіз жұтылуы – OSCs тиімділігінің төмен болуына негізгі себеп болып табылады.

OSCs тиімділігі мен тұрақтылығын арттыру мәселесін шешуге арналған көптеген тәсілдер белгілі. Солардың бірі – OSCs құрылымына металл наноқұрылымдарын енгізу. Жоғары өнімді органикалық күн ұяшықтарын (OSCS) жасау үшін фотоэлектрлік құрылғылардың белсенді қабатында үшінші компонент ретінде қолданылатын екі өлшемді материалдар кеңінен қолданыс тапты. OSCs-та пайдаланылатын наноматериалдардың алуан түрлілігі ішінде екі өлшемді қабатты материалдар өздерінің тамаша оптоэлектрондық қасиеттеріне, энергия аймақтарының реттелетін құрылымына, сондай-ақ салыстырмалы түрде тұрақты физикалық және химиялық сипаттамаларына байланысты OSCS-тің әртүрлі бөліктерінде қолдануға келешегі зор.

Органикалық аралас ионды-электрондық өткізгіштердің (OMIEC) пайда болуы органикалық электрониканың қолданылу аясын едәуір кеңейтті. Бұл органикалық электрохимиялық жүйелердегі түзету әсері Шоттки тосқауылдарына немесе кіріктірілген потенциалдарға емес, электрохимиялық градиенттерден туындайтын өткізгіштіктің кеңістіктік біртекті емес иондық модуляциясына негізделген. Бұл оларды дәстүрлі диодтардан ерекшелендіріп, олардың жұмысын наносұйықтық диодтарына, иондық мемристорларға және жасанды синапстарға жақындатады. Бұл иілгіш электроника құрылғыларындағы түзету механизмдерін түсіну олардың логикалық схемаларда, биоэлектроникада және энергия түрлендіруде әлеуетін ашу үшін қажет. Алайда соңғы қызығушылыққа қарамастан, полимер негізіндегі құрылғылардағы электрохимиялық түзетуді жүйелі зерттеулер шектеулі күйінде қалып отыр. Құрылғы геометриясы, материал морфологиясы, қақпа қосылу сұлбасы мен ығысудың полярлығы сияқты факторлардың түзету

дәрежесіне қалай әсер ететіні жөнінде әлі де айқындық жоқ. Сонымен қатар, мұндай құрылғылардың уақытқа тәуелді сипаттамаларын, соның ішінде гистерезис пен индуктивтік әсерлерді қалыптастырудағы иондық динамиканың рөлі толық зерттелмеген. Бұл факторлар практикалық жағдайда жұмыс істей алатын тұрақты әрі тиімді түзеткіштерді әзірлеу үшін шешуші рөл атқарады.

**Диссертациялық зерттеудің мақсаты** – TMDs нанобөлшектері және иондармен модификацияланған органикалық қабыршақтардағы заряд тасымалдаушылардың тасымалдану механизмдерін зерттеу.

Қойылған мақсатқа жету үшін жұмыс барысында келесідей **міндеттер** шешілді:

- $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерін лазерлік абляция әдісімен синтездеу;
- $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерінің оптикалық қасиеттерін зерттеу;
- $\text{PЗНТ:PC}_{61}\text{BM}$  негізіне  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектері легирленген нанокомпозитті органикалық күн ұяшықтарын дайындау;
- Органикалық күн ұяшықтарындағы заряд тасымалдаушылардың тасымалдануы мен рекомбинация процестеріне  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерінің әсерін талдау;
- ОМІЕС-материалдары негізінде ОЕСТ-дегі өтпелі процестерді зерттеу, ток релаксацияларының асимметриясын және легирлеу, сарқылу мен бейтарап күй режимдерінің ықпалын анықтау;
- Ағын потенциалы, арнадағы потенциалдың біркелкі таралмауы және бойлық иондық диффузия ескерілетін қолданыстағы үлгілердің қолданылу мүмкіндігін бағалау және өтпелі процестердің аналитикалық сипаттамасын жасау;
- Ағын тогының аса көп шығу (overshoot) және релаксация әсерін эксперименттік зерттеу, өтпелі жауап параметрлерінің ағын кернеуіне және азайған күй ұзақтығына тәуелділігін анықтау;
- Органикалық электрохимиялық түзеткіштің (OECR) моделін әзірлеу және верификациялау, төмен кернеулерде түзетуді алу және теріс дифференциалдық кедергінің пайда болу критерийін орнату.

**Зерттеу нысандары**  $\text{PЗНТ:PC}_{61}\text{BM}$  негізіндегі  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектері қосылған полимерлі нанокомпозиттік материалдар, сондай-ақ жартылай өткізгіш полимер  $\text{PЗНТ}$  негізіндегі органикалық электрохимиялық транзисторлар.

**Зерттеу әдістері:** Эксперименттік зерттеулер оптикалық спектроскопия, рентгендік дифракция, сканирлеуші электрондық микроскопия, атомдық-күштік микроскопия, вольт-амперометрия және импеданстық спектроскопия әдістерімен жүргізілді.

**Ғылыми жаңалық** келесі негізгі нәтижелерді қамтиды:

1.  $\text{PЗНТ:PC}_{61}\text{BM}$  қабыршағының морфологиясы мен құрылымына нанобөлшектердің әсері анықталды.  $\text{PЗНТ:PC}_{61}\text{BM}$  фотобелсенді қабатына  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерін қосу қабыршақтың кедір-бұдырлығы мен беттік ақауларын азайтып, кристалдану дәрежесін арттыратыны көрсетілді.

2. Полимерлі күн ұяшығындағы заряд тасымалдаушылардың инъекциясы мен тасымалдануына  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерінің әсері көрсетілді.  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерімен допинг жасау рекомбинацияны және ETL-қабат/ $\text{P3HT}:\text{PC}_{61}\text{BM}$  шекарасындағы фаза аралық кедергіні төмендететіні анықталды.

3. Композитті  $\text{P3HT}:\text{PC}_{61}\text{BM}$  қабаты құрамындағы  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерінің шекті концентрациясы анықталды, ол сәйкесінше 0,5 wt% және 0,35 wt% құрады.  $\text{P3HT}:\text{PC}_{61}\text{BM}$  құрамында көрсетілген концентрацияда нанобөлшектер болған жағдайда полимерлі күн ұяшығының тиімділігі ең жоғары мәнге жетеді.

4. Өтпелі жауаптың жаңа түзілу механизмдерін айқындайтын ОЕСТ-дегі өтпелі процестердің асимметриясы және токтың аса көп шығу (overshoot) әсері анықталды.

5. Органикалық электрохимиялық түзеткіш (OECR) және оның токтың түзетілу шарттарын сипаттауға мүмкіндік беретін аналитикалық моделі әзірленіп, іске асырылды.

**Диссертацияның құрылымы мен көлемі.** Диссертациялық жұмыстың құрылымы қойылған міндеттерге сәйкес орындалып, кіріспеден, 4 бөлімнен, қорытындыдан, пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Диссертация 93 бетті құрайтын мәтіннен, 44 суреттен, 5 кестеден, 187 пайдаланылған әдебиеттер тізімінен тұрады.

#### **Қорғауға шығарылған негізгі қағидаттар:**

1.  $\text{P3HT}:\text{PC}_{61}\text{BM}$  фотобелсенді қабатындағы  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектері кристалдық дәреженің артуына және қабыршақтағы беттік ақаулардың азаюына ықпал етеді.

2.  $\text{P3HT}:\text{PC}_{61}\text{BM}$  құрамында  $\text{MoS}_2$  нанобөлшектерінің 0,5wt% және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерінің 0,35 wt% шекті концентрацияларында органикалық күн ұяшығының (OSC) тиімділігі ең жоғарғы мәнге жетеді.

3. ОЕСТ-дегі өтпелі процестердің асимметриясы қақпаның электрлік күй режимімен анықталады: қақпа жерге тұйықталғанда, арна мен қақпа арасындағы потенциалдар айырмасы нәтижесінде арнаның допингтелуі немесе дедопингтелуі орын алады, ал тізбек ажыратылған режимде арнада көрсетілген процестер жүрмей, бейтарап күйде қалады.

4. ОЕСТ негізіндегі тәжірибелік түрде іске асырылған органикалық электрохимиялық түзеткіштің (OECR) ток түзетілуі ағындағы оң ығысу кезінде оның потенциалы жерге тұйықталған қақпаның потенциалынан жоғары болғанда каналдың электрохимиялық допингтелуімен, ал теріс ығысу кезінде оның потенциалы қақпа потенциалынан төмен болғанда арнаның дедопингтелуімен шартталған.

**Диссертациялық жұмыстағы автордың жеке үлесі.** Автор  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектерін синтездеу және оларды полимерге енгізе отырып нанокомпозитті күн ұяшықтарын құрастыру, әрі  $\text{P3HT}$  полимері негізінде органикалық электро-химиялық транзистор жинау бойынша зерттеу жұмыстарын жүргізді. Оптикалық өлшеулер жүргізіліп, алынған наноқұрылымдар және нанокомпозитті қабыршақтарының бет морфологиясы

атомдық күштік микроскоп, сканерлеуші электронды микроскоп әдістерімен зерттелді. Жұтылу спектрлері, Комбинациялық шашырау спектрлері, импеданс спектрлері, сондай-ақ күн ұяшықтарының вольт-амперлік сипаттамалары (BAC) өлшенді. Эксперименттік өлшеулердің нәтижелері компьютерлік түрде өңделді. Алынған нәтижелердің талдауы мен жұмыстың қорытындылары жалпы ғылыми жетекшілермен бірлесіп жасалды.

**Жұмыстың ғылыми-зерттеу бағдарламалармен байланысы.** Диссертация Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі үйлестіретін іргелі зерттеулер бағдарламасы аясындағы ғылыми-зерттеу жұмыстарының жоспарларына сәйкес орындалды: «Өтпелі металл дихалькогенид нанобөлшектері енгізілген жоғары өнімді органикалық фототүрлендіргіш» (ЖТН 19679109, 2023–2025). Транзисторлармен және түзеткіштермен байланысты бөлім «Органикалық электрохимиялық транзисторларда өтпелі процестердің кешенді зерттеуі және олардың қосу жылдамдығын оңтайландыру» (ЖТН AP26194217, 2025-2027) жобасы аясында жасалды.

**Жұмыстар мен жарияланымдардың апробациясы.** Жұмыстың негізгі нәтижелері мына конференцияларда баяндалып, талқыланды: Фотоника және ақпараттық оптика бойынша XIV Халықаралық конференция. Ғылыми еңбектер жинағы (Мәскеу, 2025) М.: ҰЯУ МИФИ; «XVI Сагинов оқулары. Білім, ғылым және өндірістің интеграциясы» атты халықаралық ғылыми-тәжірибелік конференция (Қарағанды, 2024).

**Мақалалар.** Диссертация тақырыбы бойынша 4 баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 2 мақала Clarivate Analytics және Scopus деректер базасында индекстелетін журналдарда және 2 мақала ҚР ҒЖБССҚК ұсынған басылымдарда жарияланды.

**Жұмыстың ғылыми – тәжірибелік маңыздылығы.**  $\text{MoS}_2$  және  $\text{WSe}_2$  нанобөлшектері қосылған РЗНТ:PCBM негізіндегі нанокомпозитті қабықшаларды алудың жоғары тұрақтылығымен және өнімділігімен ерекшеленетін технологиясы әзірленді. Органикалық күн ұяшығының жоғары пайдалы әсер коэффициентін қамтамасыз ететін оңтайлы параметрлері оның құрылымдық ерекшеліктері мен дайындау технологиясы анықталды. Ұсынылған технология электрондық аспаптар мен құрылғылардың кең ауқымы үшін жеңіл, технологиялық және жаппай өндірісте үнемді автономды қуат көздерін жасауға мүмкіндік ашады.

ОЕСТ негізіндегі әзірленген органикалық электрохимиялық түзеткіш (OECR) биоэлектроникадағы сигналдарды түзету және өңдеу сұлбаларында, соның ішінде әлсіз физиологиялық сигналдарды тіркеуге арналған сенсорлар мен интерфейстерде, сондай-ақ импульстік жауаптарды генерациялау мен модуляциялауды қажет ететін нейроморфтық құрылғылардың прототиптерінде қолданылуы мүмкін. Ұсынылған тәсілдер төмен вольтты органикалық диодтарды, қатты денелі сенсорларды және органикалық электрониканың басқа да компоненттерін жобалау кезінде пайдаланылуы мүмкін, бұл олардың медициналық диагностиканы, иілгіш электрониканы және биосәйкесті есептеу жүйелерін қоса алғандағы практикалық қолдану аясын кеңейтеді.