АННОТАЦИЯ

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

АХАТОВА ЖАННУР ЖАНАРБЕКОВНА

Транспорт и рекомбинация носителей заряда в органических полупроводниковых нанокомпозитах

Актуальность темы. Органические солнечные элементы OSCS относящиеся к фотоэлектрическим устройствам третьего поколения, в последние годы развиваются стремительными темпами, предлагая значительные преимущества благодаря своей низкой стоимости, легкости, простоте производства и возможности изготовления на больших площадях. Однако, относительно низкий КПД устройства а долгосрочная нестабильность ограничивает их промышленное производство и коммерциализацию. Повышенная электронно-дырочная рекомбинация, низкая подвижность носителей заряда в активных слоях и недостаточное поглощение солнечного света являются основными причинами низкой эффективности OSCs.

Известно множество решений для решения проблемы повышения эффективности и стабильности OSCS. Одним из них является внедрение металлических наноструктур в OSCS. Для создания высокопроизводительных OSCS широкое распространение получили двумерные материалы, используемые в активном слое фотоэлектрических устройств в качестве третьих компонентов. Среди многообразия наноматериалов, применяемых в OSCS, двумерные слоистые материалы могут рассматриваться как перспективные кандидаты для применения в различных положениях OSCS благодаря их превосходным оптоэлектронным характеристикам, перестраиваемой структуре энергетических зон и относительно стабильным физическим и химическим свойствам.

Появление органических смешанных ионно-электронных проводников (OMIEC) значительно расширилосферу применения органической электроники. Выпрямляющее действие в этих органических электрохимических системах обусловлено не барьерами Шоттки или встроенными потенциалами, а скорее пространственно неоднородной ионной модуляцией проводимости, обусловленной электрохимическими градиентами. Это отличает их от традиционных диодов и приближает их работу к работе наножидкостных диодов, ионных мемристоров и искусственных синапсов. Понимание механизмов выпрямления в этих устройствах мягкой электроники необходимо для раскрытия их потенциала в логических схемах, биоэлектронике и преобразовании энергии. Однако, несмотря на недавний интерес, систематические исследования электрохимического выпрямления в устройствах на основе полимеров остаются ограниченными. До сих пор нет ясности в отношении того, как такие факторы, как геометрия устройства,

морфология материала, схема подключения затвора и полярность смещения, влияют на степень выпрямления. Более того, роль ионной динамики в формировании зависящих от времени характеристик таких устройств, включая гистерезис и индуктивные эффекты, до конца не изучена. Эти факторы имеют решающее значение для разработки стабильных и эффективных выпрямителей, которые могут работать в практических условиях.

Цель диссертационного исследования исследование механизмов переноса носителей заряда в органических пленках модифицированных наночастицами TMDs и ионами.

Для достижения поставленной цели в процессе выполнения работы решались следующие **задачи:**

- синтез наночастиц MoS_2 и WSe_2 методом лазерной абляции;
- исследование оптических свойств наночастиц MoS_2 и WSe_2;
- изготовление нанокомпозитных органических солнечных элементов на основе P3HT:$PC_{61}BM$, легированных наночастицами MoS_2 и WSe_2
- анализ влияния наночастиц MoS_2 и WSe_2 на процессы транспорта и рекомбинации носителей заряда в органических солнечных элементах.
- изучение переходных процессов в OECT на основе OMIEC-материалов, выявление асимметрии релаксаций тока и влияние режимов обогащения, обеднения и нейтрального состояния.
- оценка применимости существующих моделей и разработка аналитического описания переходных процессов, учитывающих потенциал стока, неоднородность распределения потенциала в канале и продольную ионную диффузию.
- экспериментальное исследование эффекта перескока (overshoot) и релаксации тока стока, определение зависимости параметров переходного отклика от напряжения стока и длительности обеднённого состояния.
- разработка и верификация модели органического электрохимического выпрямителя (OECR), установление критерия для получения выпрямления и возникновения отрицательного дифференциального сопротивления при низких напряжениях.

Обьектами исследования являются полимерные нанокомпозитные материалы на основе P3HT:PCBM допированные наночастицами MoS_2, WSe_2, и органические электрохимические транзисторы на основе полупроводникового полимера P3HT.

Методы исследования: Экспериментальные исследования проводились методами оптической спектроскопии, рентгеновской дифракции, сканирующей электронной микроскопии, атомно-силовой микроскопии, вольтамперометрии и импедансной спектроскопии.

Научная новизна включает следующее:

1. Установлено влияние наночастиц на морфологию и структуру пленки P3HT:PCBM. Показано, что примесь наночастиц MoS_2 и WSe_2 в фотоактивном слое P3HT:PCBM способствуют уменьшению шероховатости и поверхностных дефектов пленки а также к увеличению степени кристаллизации.

2. Показано влияние наночастиц WSe_2 на инжекцию и транспорт носителей заряда в полимерном солнечном элементе. Установлено, что допирование наночастиц MoS_2, и WSe_2 способствуют снижению рекомбинации и межфазного сопротивления на границе ETL-слой/P3HT:PC61BM.

3. Определена критическая концентрация наночастиц MoS_2 и WSe_2 в составе композитного P3HT:PCBM слоя, которая составляет 0,5 мас.% и 0,35 мас.% соотвественно. При данной концентрации наночастиц в P3HT:PCBM эффективность полимерного солнечного элемента достигает максимального значения.

4. Установлена асимметрия переходных процессов и эффект перескока тока в OECT, определяющие новые механизмы формирования переходного отклика.

5. Разработан и реализован органический электрохимический выпрямитель (OECR), а также его аналитическая модель, позволяющая описать условия выпрямления тока.

Структура и объем диссертации. Структура диссертационной работы определена поставленными задачами и состоит из введения, 4 разделов, заключения, библиографии и приложения. Она изложена на 93 страницах машинописного текста, иллюстрируется 44 рисунками, 5 таблицами, содержит список использованной литературы из 187 наименований.

Положения, выносимые на защиту:

1. Наночастицы MoS_2 и WSe_2 в фотоактивном слое P3HT:PC61BM способствуют повышению кристалличности и уменьшению поверхностных дефектов пленки.

2. Существует критическая концентрация наночастиц MoS_2 0,5 мас.% и WSe_2 0,35 мас.% в P3HT:PCBM при которой эффективность OSC достигает максимального значения.

3. Асимметрия переходных процессов в OECT определяется режимом электрического состояния затвора: при его заземлении возникает допирование или дедопирование канала вследствие разности потенциалов между каналом и затвором, тогда как в режиме разомкнутой цепи канал остаётся в нейтральном состоянии без протекания указанных процессов.

4. Выпрямление тока экспериментально реализованого органического электрохимического выпрямителя (OECR) на основе OECT обусловлено электрохимическим допированием канала при положительном смещении на стоке, когда его потенциал превышает потенциал заземлённого затвора и дедопированием канала при отрицательном смещении, когда его потенциал становится ниже потенциала затвора.

Личный вклад диссертанта. Автор провёл исследования по синтезу наночастиц MoS_2 и WSe_2, их внедрению в полимер с целью создания нанокомпозитных солнечных элементов, а также по сборке органического электрохимического транзистора на основе полимера P3HT. Были выполнены оптические измерения, исследована поверхностная морфология полученных наноструктур и нанокомпозитных плёнок методами атомно-силовой и

сканирующей электронной микроскопии. Проведены измерения спектров поглощения, спектров комбинационного рассеяния (КРС), импедансных спектров, а также вольт-амперных характеристик (ВАХ) солнечных элементов. Результаты экспериментальных измерений были обработаны компьютерными методами. Анализ полученных результатов и выводы по работе выполнены совместно с научными руководителями.

Связь работы с научно-исследовательскими программами. Диссертация выполнялась в соответствии с планами научно-исследовательских работ по Программе фундаментальных исследований, координируемых Министерством науки и высшего образования Республики Казахстан: «Высокопроизводительный органический фотопреобразователь, допированный наночастицами дихалькогенидов переходных металлов» (AP 19679109, 2023-2025), «Комплексное исследование переходных процессов в органических электрохимических транзисторах и оптимизация их скорости переключения» (AP26194217, 2025-2027).

Апробация работы и публикации. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на конференциях: XIV Международной конференции по фотонике и информационной оптике. Сборник научных трудов (Москва 2025) М.: НИЯУ МИФИ; Международная научно-практическая конференция «XVI Сагиновские чтения. Интеграция образования, науки и производства» (Караганда 2024).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 4 научных работ, в том числе 2 работы в журналах, индексируемых в базах Clarivate Analytics и Scopus, и 2 работы в изданиях, рекомендуемых КОКСНВО РК.

Научно-практическая значимость работы. Разработана технология получения нанокомпозитных пленок на основе P3HT:PCBM с наночастицами MoS_2 и WSe_2, отличающегося высокой стабильностью и производительностью. Определены оптимальные параметры органической солнечной ячейки — включая структурные особенности и технологию изготовления, — которые обеспечивают высокий коэффициент полезного действия. Предложенная технология открывает перспективы создания лёгких, технологичных и экономичных в массовом производстве автономных источников питания для широкого спектра электронных приборов и устройств.

Разработанный органический электрохимический выпрямитель (OECR) на основе OECT может применяться в схемах выпрямления и обработки сигналов в биоэлектронике, включая сенсоры и интерфейсы для регистрации слабых физиологических сигналов, а также в прототипах нейроморфных устройств, где требуется генерация и модуляция импульсных откликов. Предложенные подходы могут быть использованы при проектировании низковольтных органических диодов, твердотельных сенсоров и других компонентов органической электроники, что расширяет спектр их практического применения в медицинской диагностике, гибкой электронике и системах биосовместимых вычислений.