

АННОТАЦИЯ

8D05302 – ФИЗИКА Философия докторы (PhD) дәрежесіне іздену үшін
ұсынылған диссертация

БЕЙСЕМБЕКОВ МЕЙІРХАН ҚҰРМАНҒАЗЫҰЛЫ

Кемтік тасымалдаушы қабаты NiOx/фталоцианин негізіндегі инверттелген перовскитті күн элементі

Тақырыптың өзектілігі. Инверттелген перовскитті күн элементтері жақсартылған тұрақтылығымен, иілгіш негіздермен үйлесімділігімен, сондай-ақ тандемді күн элементтерінде қолдану перспективаларымен назар аудартады. Алайда олардың энергияны түрлендіру тиімділігі дәстүрлі PSCs-ке қарағанда сәл төмен. Инверттелген PSCs-тің тиімділігі мен тұрақтылығының одан әрі артуын шектейтін негізгі мәселе PSCs-тің негізгі компоненттерінің деградациясымен, фотоэлектрлік сипаттамалардың тұрақсыздығымен және инверттелген PSCs құрылымының жеткілікті дәрежеде оңтайландырылмауымен байланысты.

Инверттелген PSCs-тің негізгі құрамдас бөліктерінің бірі — фотобелсенді перовскит қабатымен гетерооткел түзетін кемтіктік өткізгіштік қабаты (HTL). HTL-дегі заряд тасымалдаушылардың инжекциясы мен тасымалының тиімділігі инверттелген PSCs-тің фотоэлектрлік сипаттамалары мен тұрақтылығын айқындайды.

Осылайша, қосқабатты кемтіктік-тасымалдау қабаттарында заряд тасымалдаушылардың тасымалы мен рекомбинация механизмдерін зерттеу неғұрлым тиімді әрі тұрақты күн элементтерін мақсатты түрде жасауға мүмкіндік береді, бұл инверттелген PSCs құрастыру технологиясын айтарлықтай жеңілдетеді.

Зерттеудің мақсаты – NiOx/MPc кемтікті тасымалдаушы қабаттарының инверттелген перовскитті күн элементтеріндегі зарядтардың тасымалдануымен рекомбинациясына әсерін зерттеу.

Қойылған мақсатқа жету үшін жұмыс барысында төмендегі міндеттер шешілді:

- NiOx қабыршақтарының морфологиялық, оптикалық және фотоэлектрлік сипаттамаларына күйдіру ортасының және әртүрлі күйдіру температураларының әсерін зерттеу;

- Фталоцианиндердің нанокұрылымдарын термиялық вакуумдық буландыру және бу фазасынан физикалық градиентті-температуралық тұндыру әдістерімен алу;

- NiOx және фталоцианиндердің нанокұрылымдарына негізделген қосқабатты қабыршақтарды алу технологиясын әзірлеу;

- NiOx/MPc қосқабатты қабыршақтарында заряд тасымалдаушылардың тасымалдануы мен рекомбинация процестерін зерттеу;

– NiOx/MPC нанокөпозиттік қабыршақтарының бетінде перовскит қабатын синтездеу;

– Фталоцианиндердің нанокұрылымдарының инверттелген перовскитті күн элементтерінің (PSCs) фотовольтаикалық және электрлік-тасымалдау сипаттамаларына әсерін зерттеу;

– NiOx/MPC нанокұрылымданған қабыршақтарына негізделген инверттелген перовскитті күн элементтерінің тұрақтылығын зерттеу.

Зерттеу нысандары инверттелген перовскитті күн элементтері болды. Никель оксидінің нанокұрылымданған қабыршақтары. Фталоцианиннің және оның металлокомплекстерінің нанокұрылымдары. Никель оксиді мен фталоцианин нанокұрылымдары негізіндегі қосқабатты қабыршақтар.

Зерттеу әдістері: Эксперименттік зерттеулер оптикалық спектроскопия, сканерлеуші электрондық микроскопия, атомдық-күштік микроскопия, вольт-амперлік өлшеулер, импеданстық спектроскопия және рентгендік дифракция әдістерімен жүргізілді.

Ғылыми жаңалығы төмендегілерді қамтиды:

1. Никель оксиді қабыршақтарын синтездеудің оңтайлы технологиялық шарттары анықталды. Қыздыру температурасы мен алынған қабыршақтардың электрфизикалық қасиеттері арасындағы өзара байланыс орнатылды. Қыздыру температурасы 200°C-тан 450°C-қа дейін артқан кезде бетінің орташа квадраттық ауытқуы R_a мәнінің ұлғаюы және NiOx қабыршақтардың қалыңдығының азаюы байқалатыны көрсетілді, бұл тығыздыққа қабыршақтың түзілуімен байланысты.

2. NiOx-ке жанасатын сыртқы электродтардың кедергісі қыздыру температурасының артуымен өсетіні, ал NiOx/электрод шекарасындағы рекомбинация кедергісінің төмендейтіні анықталды. Қыздыру температурасы жоғарылаған сайын қабыршақ кедергісі R1-дің артуы қабыршақтың тығыздалуымен байланысты, ал R2 кедергісінің азаюы NiOx/электрод шекарасында кемтіктер рекомбинациясының күшеюімен түсіндіріледі. Термиялық қыздыру нәтижесінде тығыздыққа NiOx қабыршақтың түзілуі кемтіктердің шартты қозғалғыштығының төмендеуіне алып келетіні көрсетілді.

3. Металлофталоцианиндердің нанокұрылымдарының құрылымдық ерекшеліктері мен ондағы заряд тасымалдаушылардың генерациясы және тасымалының тиімділігі арасындағы өзара байланыс анықталды. Түйіршік шекараларының тығыздығының азаюы ақаулар санын төмендетіп, заряд тасымалының тиімділігін арттыратыны және PSCs сипаттамаларын жақсартатыны көрсетілді.

4. MPC аралық қабаты спектралдық сезімталдықты кеңейтетін және инверттелген PSCs тиімділігін арттыратын фотобелсенді қабат қызметін атқаратыны анықталды. Кемтіктерді тасымалдау үшін аралық қабат ретінде кобальт фталоцианиннің енгізу перовскитті күн элементтерінің фотоэлектрлік сипаттамаларын айтарлықтай жақсартып, олардың тұрақтылығын арттыратыны көрсетілді.

5. Нанотаспаларда фталоцианин молекулалары молекулалық ось бойымен реттеліп, ламельдік құрылым түзетіні және соның нәтижесінде заряд тасымалдаушылардың еркін жүріс ұзындығы артатыны анықталды. Бұл МРс аралық қабатының өткізгіштігінің өсуіне әкеледі. H_2Pc -тен CoPc -ке өту барысында заряд тасымалдаушылардың қозғалғыштығы артатыны көрсетілді. Нәтижесінде NiO_x қолданылған PSCs тиімділігінен (18,1%), NiO_x/CoPc негізіндегі HTL бар PSCs ең жоғары тиімділікке — 20,7% жетті.

Қорғауға ұсынылатын негізгі қағидаттар:

1. NiO_x қабыршақтарын 200–450 °C температурада термиялық қыздырғанда NiO_x/Al шекарасындағы өтпелі кедергісі төмен, жұқа әрі тығыз қабыршақтар қалыптасты.

2. NiO_x/MPc қосқабатты өткізу қабаты жарықты жұту қарқындылығын арттыруға әсер етіп, кемтіктердің тасымалдануын арттырып, инверттелген перовскитті күн элементтерінің тиімділігін 18,9 %-ға дейін жоғарылатты.

3. Перовскит пен NiO_x арасындағы CoPc нанотаспаларынан тұратын аралық қабатталған құрылымы жарық жұтылуы кезінде заряд тасымалдаушылардың тығыздығын арттырып, кемтіктердің қозғалғыштығын 3,7 есе ұлғайтып, перовскитті күн элементтерінің ПӘК 20,7 %-ға жетті.

Диссертанттың жеке үлесі. Автор фталоцианиндердің нанокұрылымдарын алу бойынша жұмыстарды орындады. NiO_x және фталоцианин мен оның металлокомплекстері негізінде кемтік-тасымалдау қабатының қосқабатты қабыршақтары дайындалды. Алынған нанокұрылымдар мен қосқабатты қабыршақтардың беткі морфологиясы атомдық-күштік және сканерлеуші электрондық микроскопия әдістерімен зерттелді. Жұтылу спектрлері, РФА спектрлері, вольт-амперлік сипаттамалар, импеданстық спектрлер және күн элементтерінің тұрақтылығы өлшенді. Эксперименттік өлшеулер нәтижелеріне компьютерлік өңдеу жүргізілді. Алынған нәтижелерді талдау және жұмыстың жалпы қорытындылары ғылыми кеңесшілермен бірлесе отырып жасалды.

Жұмыстың ғылыми-зерттеу бағдарламаларымен байланысы. Диссертациялық жұмыс Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті үйлестіретін іргелі зерттеулер бағдарламалары аясында орындалды: АР19576784 «Перовскитті күн элементтерінің тиімділігі мен тұрақтылығын арттыру үшін фталоцианин мен оның металлкешендерін пайдалану» (2023-2025.), АР19679938 « NiO_x/MPc негізіндегі қосқабатты нанокұрылымды композиттік қабыршақтарға негізделген перовскитті күн элементтерін әзірлеу» (2023-2025).

Жұмыстың апробациясы және жарияланымдар. Жұмыстың негізгі нәтижелері келесі конференцияларда баяндалып, талқыланды: Фотоника және ақпараттық оптика бойынша XIV Халықаралық конференция: ғылыми еңбектер жинағы. Ұлттық ядролық зерттеу университеті МИФИ. – Мәскеу. – 2025. – 307–308-бб.; академик Е.А. Букетовтың 100 жылдығына арналған Халықаралық ғылыми конференция материалдары бойынша еңбектер жинағы. – Қарағанды. – 2025. – 24–27-бб.; Қазіргі физикалық ғылымның инновациялық дамуы: жаңа тәсілдер мен өзекті зерттеулер атты

Халықаралық ғылыми конференция еңбектер жинағы. – Қарағанды. – 2025. – 29–33-бб.

Жарияланымдар. Диссертациялық жұмыстың нәтижелері бойынша 7 баспа жұмысы жарияланды: Thomson Reuters және Scopus дерекқорларына кіретін журналдарда 3 мақала (Optical Materials, 2024, IF – 3,9, Q2, процентиль – 72; Small, 2025, IF – 12,1, Q1, процентиль – 92; Materials Letters, 2025, IF – 2,7, Q3, процентиль – 73); Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған журналда 1 мақала, сондай-ақ халықаралық және республикалық конференциялар материалдарында 3 жарияланым.

Жұмыстың практикалық маңыздылығы:

1. Никель оксиді мен фталоцианин негізіндегі нанокұрылымдардың зерттелген электрофизикалық қасиеттері оларды оптоэлектрондық құрылғыларда, сондай-ақ инверттелген күн элементтерінің құрамдас бөліктері ретінде практикалық қолдану әлеуетін айқындайды.

2. Фталоцианиндердің жоғары химиялық және температуралық тұрақтылығы перовскиттің деградация арнасын бөгеп, перовскит қабаты мен никель оксиді арасындағы тікелей байланысты болдырмауға мүмкіндік береді. Бұл инверттелген PSCs-тің фотоэлектрлік сипаттамаларын жақсартуға және олардың тұрақтылығын арттыруға алып келеді.

3. HTL қабаттарын жағу әдістерін оңтайландыру және беткі қабатын мақсатты түрде модификациялау жоғары тиімді әрі тұрақты күн элементтерін жасауға мүмкіндік береді, бұл инверттелген PSCs өндірісінің өзіндік құнын төмендетеді.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі. Диссертациялық жұмыстың құрылымы қойылған міндеттерге сәйкес анықталған және кіріспеден, 4 бөлімнен, қорытындыдан, библиографиядан және қосымшадан тұрады. Жұмыс 99 беттік мәтінде баяндалған, 49 сурет, 17 кестемен және 199 атаудан тұратын пайдаланылған әдебиеттер тізімін қамтиды.